现代数学手册

·随机数学卷

Modern Mathematics Handbook

《现代数学手册》编纂委员会

· 华中科技大学出版社 ·

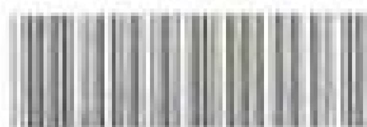
现代数学手册

MODERN MATHEMATICS HANDBOOK

随机数学卷

《现代数学手册》编纂委员会





· 华中科技大学出版社 ·
（华中理工大学出版社）
中国·武汉

图书在版编目(CIP)数据

现代数学手册·随机数学卷/《现代数学手册》编纂委员会
武汉:华中科技大学出版社,2000年12月
ISBN 7-5609-2175-2

Ⅰ.现…
Ⅱ.现…
Ⅲ.①数学-手册 ②概率论-手册
Ⅳ.O 1-62

现代数学手册·随机数学卷 《现代数学手册》编纂委员会

责任编辑:叶见欣 姜新祺 封面设计:刘 卉
责任校对:张 欣 责任监印:张正林

出版发行:华中科技大学出版社 武昌喻家山 邮编:430074 电话:(027)87545012
经销:新华书店湖北发行所

录排:湖北省新华印刷厂
印刷:湖北省新华印刷厂

开本:880×1230 1/32 印张:29.5 插页:6 字数:1 130 000
版次:2000年12月第1版 印次:2000年12月第1次印刷 印数:1—8 000
ISBN 7-5609-2175-2/O·208 定价:88.00元

《现代数学手册》编纂委员会

前　言

在人类开始跨入21世纪的历史时期，人们已普遍地看到了一种历史现象，即数学问题的多样性与数学应用的广泛性及深入性，已经成为现代科技发展的重要特征。可以预期，伴随着计算机科技在新世纪里的不断发展，此特征今后还将以更高的水平显示出来。

在中国，"科学技术是第一生产力"（邓小平名言）已逐渐成为人们信奉的朴实真理。国家富强显然要以第一生产力即科技的发达为必要条件。但是，如展没有近、现代发展起来的数学各分支学科作工具，当然也就不会有现代科技。因此"国家富强必须要依靠数学发达"这句经典名言（拿破仑(Napoleon)名言），自然也是一条不容置疑的客观真理。

基于上述认识，在华中理工大学出版社的倡议与要托下，我们通过集体协作，努力编纂了这部《现代数学手册》巨著，其目的正是怀着对我国将在新世纪里能尽快成为富强国家的热切希望，而欲为科技界提供一份力所能及的奉献。具体说来，这部工具性巨著服务的读者（或使用者）对象，包括广大科学工作者、工程技术人员、经济管理工作者、高等院校的教师和学生等。

那么，作为数学工真书，这部巨型手册要求具备哪些特点呢？在编写过程中，出版社负责人和我们达成了一项共识，即手册应具备科学性、先进性、实用性、规范性与简明性。200余位撰稿人与审稿人（来自中国科学院、北京大学、清华大学、复旦大学、南京大学、浙江大学、北京师范大学、厦门大学、上海交通大学、西安交通大学、中国科技大学、南开大学、武汉大学、华中理工大学、大连理工大学、南京航空航天大学、陕西师范大学等40多所高校与研究所）按照这些特点和要求付出了

艰辛的劳动。我们要感谢他们的通力合作与努力，使本手册基本上体现了上述所希冀的特点或特色。

为了读者选购和使用方便，本手册分5卷出版，分别名为“经典数学卷”、“近代数学卷”、“计算机数学卷”、“随机数学卷”和“经济数学卷”。需要指出的是，各个分支（篇目）的归属是相对的，这里考虑了各分卷篇幅大小的平衡问题。例如，“蒙特卡罗法”这一篇也可归入“计算机数学卷”。

我们要感谢诸分卷主编为精心组稿、编稿、审稿付出的精力和时间。特别要对中国科学院两位老院士钱伟长先生与吴文俊先生，以及杨叔子院士乐愿担任本手册的顾问而致以诚挚的谢忱。最后，还要对华中理工大学出版社具有远见卓识的负责人和埋头苦干的编辑人员与我们在本手册的生产全过程中的互相配合和精诚合作，深表谢忱。

《现代数学手册》编纂委员会

主编　徐利治

1999年12月于武汉

现代数学手册

篇目录

经典数学卷

近代数学卷

计算机数学卷

随机数学卷

经济数学卷

MODERN MATHEMATICS HANDBOOK

CONTENTS

CLASSICAL MATHEMATICS

MODERN MATHEMATICS

COMPUTER MATHEMATICS

STOCHASTIC MATHEMATICS

ECONOMIC MATHEMATICS

目　录

·随机数学卷·

第 1 篇

概 率 论

编　者　潘一民
审校者　陈希孺

目　录

引　言

作为研究随机现象数量规律的一门数学分支学科，概率论有着悠久的历史．早在16、17世纪，就有一些著名数学家探讨过掷骰子等赌博中出现的各种概率计算问题．瑞士数学家伯努利(J. Bernoulli)在18世纪初提出并证明了概率论的第一个极限定理，即伯努利大数律．随后，法国数学家拉普拉斯(P.S. Laplace)集前人之大成，并在概率论中引入了更有力的分析工具，证明了第二个极限定理，即中心极限定理的雏形；同时，他还从哲学的高度提出了“概率论终将成为人类知识中最主要的组成部分”的重要见解，大大扩展了概率论的应用范围．

概率论自身的发展以及20世纪初完成的一般测度论和积分论，促成了概率论公理体系的建立．经过若干学者前赴后继的努力，前苏联数学家科尔莫戈罗夫(A. N. Kolmogorov)于1933年给出了概率的测度论式的定义和一整套严密的体系，并在此基础上证明了根据给定的相容联合分布族构造一个概率测度的基本存在性定理，严格定义了最一般的条件期望与条件概率．可以说，科尔莫戈罗夫提出的体系是概率论现代化的里程碑．

在20世纪，概率论的理论和方法与数学其他分支、自然科学、工程技术以及社会经济相互交叉、渗透，取得了极其丰富的成果，已经成为一些自然科学学科、社会和经济科学学科的坚实的方法论．

1　事件与概率

1.1　随机事件

1.1.1　随机现象

在一定条件下，所得的结果不能预先完全确定，而只能确定是多种可能结果中的一种的现象称为随机现象．例如，任意掷一枚硬币，其结果有可能是出现正面，也有可能是出现反面；电话交换台在1分钟内接到的呼叫次数，可能是0次，1次，2次，…；在同一工艺条件下生产出的灯泡，其使用寿命有长有短；测量同一物体的长度时，由于仪器及观察受到环境的影响，多次测量的结果往往有差异；悬浮在液体中的微粒受周围液体分子的碰撞而产生运动(这种运动称为布朗(R. Brown)运动)，其轨道极不规则．这些都是随机现象．

使随机现象得以实现和对它的观察的全过程通称为**随机试验**．要完成一个随机试验，主要是要明确实现它的“一定条件”，以及由它产生的一切可能的“基本结

果".这里的"一定条件"可以是人为的,也可以是客观存在的;这里的"基本结果"是指随机试验最简单的、不可(或不必)再细分的结果.

1.1.2 基本空间

定义1 一个随机试验所有可能的"基本结果"ω 构成的集合称为该随机试验的**基本空间**,常用集合 $\Omega=\{\omega\}$ 表示.基本空间又称为**样本空间**,其元素 ω 又称为**样本点**.

例如,对于任意掷一枚硬币的随机试验,$\Omega=\{$正,反$\}$.又如,对于某批灯泡使用寿命(小时)的试验,$\Omega=\{t:t\geqslant 0\text{h}\}$;若规定 $t\geqslant 200\text{h}$ 为合格灯泡,否则为不合格,且所关心的问题只是合格与否,那么可以取基本空间 $\Omega=\{$不合格,合格$\}$.再如,对于布朗运动,Ω 为从空间某一坐标原点出发的所有连续轨道的全体.

在研究极限规律时,人们往往会考虑重复多次、甚至潜在的无穷多次的试验序列.例如,投掷一枚硬币,人们往往会考虑重复 n 次或想象中的无穷多次的情形,并把它们也视为一种随机试验,这时,基本结果就分别是诸如(正,反,…,反,正)这样的 n 维"向量"或"正,反,正,反,反,正,…"这样的无穷序列.若记空间 $\Omega_0=\{$正,反$\}$,则二者的基本空间可分别记为

$$\Omega=\Omega_0^n \quad \text{或} \quad \Omega=\Omega_0^\infty.$$

总之,依据不同的考察对象与目的,基本空间可以代表现实中种种不同的基本结果的全体.

1.1.3 事件

定义2 给定了基本空间 Ω,一个随机事件就是 Ω 的一个子集,也就是由某些基本结果组成的集,它表示随机试验的某种结果.随机事件又简称为事件.

原则上,指定了基本结果 ω 要满足的规定条件,就可以描述一个事件.例如,投掷两颗骰子,"其和为4点"这一事件就是子集 $A=\{(1,3),(2,2),(3,1)\}$.单个基本结果的集称为**基本事件**.

定义3 若给定一个事件 A,则"A 不发生"这个事件,称为 A 的**对立事件**,用子集 A 在 Ω 中的补集 $A^c=\Omega-A$ 表示.

定义4 若给定两个事件 A 和 B,则"A 或 B 至少有一个发生"的事件就是子集 A 与 B 的并,记作 $A\cup B$;"A 和 B 同时发生"的事件就是子集 A 与 B 的交,记作 $A\cap B$,或简记作 AB.

定义5 整个基本空间 Ω 称为**必然事件**;空集 $\varnothing$ 称为**不可能事件**.若 $AB=\varnothing$,则称事件 A 与 B 为**不相容或互斥**.

定义6 当 $A\subset B$ 时,称事件 A 的发生导致事件 B 的发生.

这样,就把事件之间的关系与运算同其集合之间的关系与运算一一对应起来了,其结论还可推广到有限个及无限个事件的场合.

需要特别指出的是,在概率论中为了保证符合规定性质的概率存在,并不总是把基本空间 Ω 的一切子集都当作事件,尤其是当 Ω 为不可数无穷集时.为了研究事件间的各种关系,记全体事件所构成的集类为 $\mathscr{F}$,要求 $\mathscr{F}$ 应满足以下三个条件:

1° $\Omega\in\mathscr{F}$;

2° 若$A\in\mathscr{F}$,则$A^c\in\mathscr{F}$;

3° 若$A_1,A_2,\cdots,A_n,\cdots\in\mathscr{F}$,则$\bigcup\limits_{i=1}^{\infty}A_i\in\mathscr{F}$.

定义 7 满足以上三条件的$\mathscr{F}$称为**事件 σ 域**,或称 **σ 域**.

从定义 7 还可推出:

$$\varnothing=\Omega^c\in\mathscr{F};\quad \bigcap_{i=1}^{\infty}A_i=(\bigcup_{i=1}^{\infty}A_i^c)^c\in\mathscr{F}.$$

1.2 概 率

1.2.1 古典概型

从直观意义上说,**概率是随机事件发生的可能性的量度**. 在概率论发展的初期,主要的研究对象局限于随机试验所有基本结果为有限个等可能的情形,即所谓**古典概型**问题. 这时基本空间 Ω 由 N 个基本结果组成,事件 σ 域 $\mathscr{F}$由 Ω 的一切子集组成. 若事件 A 包含 n 个基本结果,则定义 A 的概率 $P(A)=n/N$. 此时,每个基本事件的概率都是 $1/N$,即所谓等可能.

对于具体的问题,其等可能性通常可由其物理特性、几何对称性或想像的完全随机性事先加以确认;而在计算 N 与 n 时,为了避免重复或漏算的错误,常常要小心谨慎,并运用多种组合数学的技巧.

例 1 设有 k 个不同的(可分辨)球,每个球都能以同样的概率 $1/l$ 落到 l 个格子($l\geqslant k$)的每一个中,且每个格子可以容纳任意多个球. 试分别求如下两事件(A 和 B)的概率:

A:某指定的 k 个格子中各有一个球;

B:存在 k 个格子,其中各有一个球.

解 由于每个球可以落入 l 个格子中的任一个,并且每一个格子中可以落入任意多个球,所以 k 个球落入 l 个格子中的分布情况相当于从 l 个格子中选取 k 个的可重复排列,故基本空间共有 l^k 种等可能的基本结果.

事件 A 所含基本结果数应是 k 个球在指定的 k 个格子中的全排列数,即 $k!$. 所以

$$P(A)=\frac{k!}{l^k}.$$

为了算出事件 B 所含的基本结果数,可设想分两步进行:因为 k 个格子可以是任意的,故可先从 l 个格子中任意选出 k 个来,选法共有$\binom{l}{k}$种;对于每种选定的 k 个格子,依上述各有一个球的推理,则有 $k!$ 个基本结果,故 B 含有$\binom{l}{k}k!$ 个基本结果. 所以

$$P(B)=\binom{l}{k}\frac{k!}{l^k}=\frac{l!}{(l-k)!\ l^k}.$$

假如把球视为粒子,把格子视为相空间中的小区域,那么这个问题就对应于统计物理学中的麦克斯韦-玻尔兹曼(Maxwell - Boltzmann)统计.

概率论的历史上有一个颇为著名的问题:求 k 个同班同学中没有两人生日相同的概率.若把这 k 个同学看作例1中的 k 个球,而把一年的365天看作为格子,即 $l=365$,则上述的 $P(B)$ 就可给出所要求的概率.例如,当 $k=40$ 时,$P(B)=0.109$.或者换句话说,40个同学中至少有两人的生日是同一天的概率为 $P(B^c)=1-P(B)=0.891$.后而这个概率出乎意料的大.

把古典概型稍作推广.仍设基本空间 Ω 仅含 N 个基本结果 $\omega_1,\omega_2,\cdots,\omega_N$,但它们的概率可以是使得 $P\{\omega_i\}\geqslant 0$ 且 $\sum_{i=1}^{N}P\{\omega_i\}=1$ 的任意数;事件 σ 域 $\mathscr{F}$ 仍由 Ω 的一切子集组成.这时任一事件 A 的概率是所有属于 A 的基本结果的概率之和:

$$P(A)=\sum_{\omega_i\in A}P\{\omega_i\}.$$

$P(A)$ 显然具有以下三条性质:

1° $0\leqslant P(A)\leqslant 1$;

2° $P(\Omega)=1$;

3° 若事件 A,B 不相容,则

$$P(A\cup B)=P(A)+P(B).$$

1.2.2 几何概率

把等可能性推广到含无穷多个基本结果的情形,就产生了**几何概率**.设 Ω 是平面上一个可求面积的区域,事件 σ 域 $\mathscr{F}$ 由 Ω 中一切可求面积的子集组成.随意扔一个点到 Ω 中,按照等可能性的思想,可认为该点落入 Ω 内任何一指定部分的概率与这一部分面积成正比,而与这一部分的形状及其在 Ω 内的位置无关.因此,若 $A\in\mathscr{F}$,用 $\mu(A)$ 表示 A 的面积,则该点落入 A 的概率

$$P(A)=\frac{\mu(A)}{\mu(\Omega)}.$$

类似的思想也可推广到一维、三维或更高维数的情形中去.

例2 布丰(C.L.Buffon)投针问题.设平面上画有等距离为 a 的一簇平行线.取一枚长为 $l(l<a)$ 的针随意扔到平面上,求针与平行线相交的概率.

解 设 x 表示针的中点到最近一条平行线的距离,θ 表示针与此直线间的交角(图1-1(a)),则 (x,θ) 完全决定针所落的位置.针的所有可能的位置为

$$\Omega=\left\{(x,\theta):0\leqslant x\leqslant\frac{a}{2},0\leqslant\theta\leqslant\pi\right\}.$$

它可用 x-θ 平面上的一个矩形来表示(图1-1(b)).针与平行线相交的充分必要条件是 $x\leqslant\frac{l}{2}\sin\theta$,即图1-1(b)中带阴影的部分,它的面积为

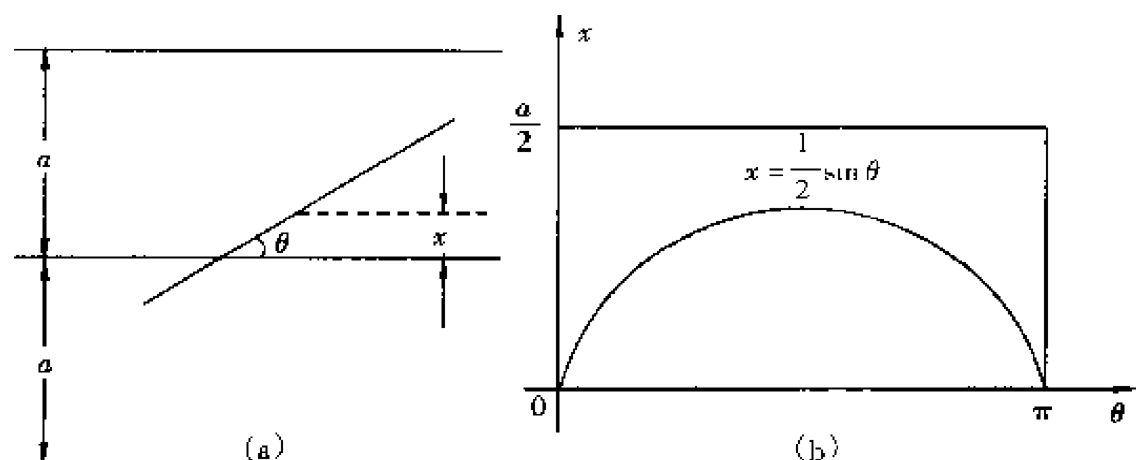


图 1-1

$$\mu(A)=\int_0^{\pi}\frac{l}{2}\sin\theta\mathrm{d}\theta=l$$

因此,若把往平面上随意扔一枚针理解为 Ω 内的任一点为等可能,且记针与任一平行线相交的事件为 A,则

$$P(A)=\frac{\mu(A)}{\mu(\Omega)}=\frac{2l}{\pi a}.$$

从几何概率的问题可以看出,概率论与以"长度"、"面积"、"体积"等为研究对象的测度论有很密切的关系.这里定义的 $P(A)$ 也满足 1.2.1 小节最后总结的三条性质.与古典概型不同的是,几何概率的基本空间是不可数无穷集,所以不可能从基本事件(单个几何点)的概率(它们一般为 0)来规定一般事件的概率,而只能是从诸如"区间"、"矩形"、"长方体"等这样的基本区域的测度出发,通过加法规则及极限过程求得一般区域的测度及概率.还须强调指出的是,由测度论可知,并非平面(相应地,实轴或空间)上的一切子集都是可求面积(相应地,长度或体积)的,即并非都可作为事件,但所有事件的全体构成一个事件 σ 域.

1.2.3 概率的频率解释

概率的一种常用的直观解释是,把 $P(A)$ 描述为在相同的环境下多次重复试验时事件 A 发生的相对频率(A 出现次数与总次数之比).例如,历史上就有人对布丰投针问题作过几千次试验,以求得 π 的近似值;到了近代,随着电子计算机的出现,人们进一步利用计算机来进行大量模拟试验,这种方法称为随机模拟法或蒙特卡罗(Monte Carlo)法.概率论的大数律(见本篇第 4 章)表明,随着试验次数的增加,事件发生的相对频率将在某种意义下越来越稳定地达到某个确定的数值.这个数值就是该事件的概率.在实际应用中,常把这个频率作为未知概率的估计,因而便有了统计概率的名称.但是反过来把它作为概率的定义,从理论上来说却是不严谨的,会产生许多矛盾和困难,而且不能包括反映个人信念程度的所谓主观概率的概念.

1.2.4 概率的公理化定义

为了克服上述诸种概型和解释的局限性，同时吸取其能反映规律性的本质性质，经过几代人的努力，科尔莫戈罗夫终于提出了为概率论学者广泛接受的概率论公理体系．同现代的几何基础公理体系不去界说诸如"点"、"线"、"面"这些几何的基本元素，而是着眼于它们之间的本质联系与性质一样，这一公理体系也是着眼于规定事件及事件概率的最基本的性质和关系，而并不去解释它们的现实背景与含义．

设基本空间 Ω 是一个任意给定的非空集合（依据不同的考察对象，其元素 ω 可以代表种种不同的基本结果，但这对概率论的逻辑发展而言是无关紧要的），事件的全体 $\mathscr{F}$ 是 Ω 的某些子集组成的一个事件 σ 域．

定义 8 如果 P 是 $\mathscr{F}$ 上的一个实值函数，即对于每一 $A\in\mathscr{F}$，有一实数 $P(A)$ 与之对应，且满足以下三条公理：

公理 1（非负性） 对于一切 $A\in\mathscr{F}$，$P(A)\geqslant 0$，

公理 2（规范性） $P(\Omega)=1$，

公理 3（可列加性） 若 $A_1,A_2,\cdots$ 是 $\mathscr{F}$ 中两两不相容的事件列，则

$$P\Big(\bigcup_{i=1}^{\infty}A_i\Big)=\sum_{i=1}^{\infty}P(A_i),$$

则称 P 是 $(\Omega,\mathscr{F})$ 上的一个**概率（测度）**，$P(A)$ 称为事件 A 的**概率**，三元组 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 称为**概率空间**．

上述公理 3 把加法规则从有限项求和强化为可数无限项求和，具有本质上的重要性，它使许多取极限的过程成为可能．

1.2.5 概率的性质

设 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 为一概率空间，由上述公理可以推得概率的下列性质：

1° $P(\varnothing)=0$．

2° 有限加性 对于任何互不相容的事件 $A_1,A_2,\cdots,A_n$，有

$$P\Big(\bigcup_{i=1}^{n}A_i\Big)=\sum_{i=1}^{n}P(A_i).$$

3° $P(A^c)=1-P(A)$．

4° 单调性 若 $A\subset B$，则 $P(A)\leqslant P(B)$．

5° **一般加法公式** 对于任意 $A,B\in\mathscr{F}$，有

$$P(A\cup B)=P(A)+P(B)-P(AB).$$

还可推广为：对于任意 $A_1,A_2,\cdots,A_n\in\mathscr{F}$，有

$$P\Big(\bigcup_{i=1}^{n}A_i\Big)=\sum_{i=1}^{n}P(A_i)-\sum_{i<j}P(A_iA_j)+\cdots+(-1)^{k-1}\sum_{i_1<\cdots<i_k}P(A_{i_1}A_{i_2}\cdots A_{i_k})+\cdots+(-1)^{n-1}P(A_1A_2\cdots A_n).$$

6° 半加性　对于任意 $A_1, A_2, \cdots, A_n, \cdots \in \mathscr{F}$ 有

$$P(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i) \leqslant \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i).$$

7° 连续性　对于任一单调上升或单调下降的事件序列 $A_1 \subset A_2 \subset \cdots$ 或 $A_1 \supset A_2 \supset \cdots$，有

$$P(\lim_{n\to\infty} A_n) = \lim_{n\to\infty} P(A_n).$$

1.3　条件概率

1.3.1　条件概率的定义

研究随机事件之间的关系时，在已知某些事件发生的条件下考虑另一些事件的概率规律有无变化及如何变化，是十分重要的．

定义 9　设 $(\Omega, \mathscr{F}, P)$ 为一概率空间，$A, B \in \mathscr{F}$ 且 $P(A) > 0$，则

$$P(B \mid A) = \frac{P(AB)}{P(A)},$$

称为已知 A 发生时 B 的**条件概率**或 **B 关于 A 的条件概率**．

例如，某集体中有 N 个男人和 M 个女人，其中患色盲者男性 n 人，女性 m 人．用 Ω 表示该集体，A 表示其中全体女性的集合，B 表示其中全体色盲者的集合．如果从 Ω 中随意抽取一人，则这个人分别是女性、色盲者和同时既为女性又是色盲者的概率分别为

$$P(A) = \frac{M}{M+N}, \quad P(B) = \frac{m+n}{M+N}, \quad P(AB) = \frac{m}{M+N}.$$

如果限定只从女性中随意抽取一人(即事件 A 已发生)，那么这个女人为色盲者的(条件)概率

$$P(B \mid A) = \frac{m}{M} = \frac{P(AB)}{P(A)}.$$

1.3.2　条件概率的性质

1° 设 $A \in \mathscr{F}$，$P(A) > 0$．当 B 取遍所有事件时，条件概率 $P(B \mid A)$ 作为 $\mathscr{F}$ 上的函数，同样满足概率的三条公理．

2° 乘法公式

$$P(AB) = P(A)P(B \mid A) \qquad (P(A) > 0);$$
$$P(AB) = P(B)P(A \mid B) \qquad (P(B) > 0).$$

更一般地，设 $A_1, A_2, \cdots, A_n \in \mathscr{F}$，$n \geqslant 2$，

$$P(A_1 A_2 \cdots A_{n-1}) > 0，则$$

$$P(A_1 A_2 \cdots A_n) = P(A_1)P(A_2 \mid A_1)P(A_3 \mid A_1 A_2) \cdots P(A_n \mid A_1 A_2 \cdots A_{n-1}).$$

3° 全概率公式　设 $A_1, A_2, \cdots, A_n \in \mathscr{F}$，两两不相容，$P(A_i) > 0$，$i = 1, 2, \cdots, n$，且

$\bigcup_{i=1}^{n} A_i = \Omega$,则对于任何 $B\in\mathscr{F}$,有

$$P(B) = \sum_{i=1}^{n} P(B \mid A_i) P(A_i).$$

4° **贝叶斯(T. Bayes)公式** 若 $A_1, A_2, \cdots, A_n$ 与性质 3°所设相同,则对于任何满足 $P(B)>0$ 的 B, $B\in\mathscr{F}$,有

$$P(A_j \mid B) = \frac{P(B \mid A_j) P(A_j)}{\sum_{i=1}^{n} P(B \mid A_i) P(A_i)} \qquad (j = 1, \cdots, n).$$

在实际应用中,A_j 常被视为导致试验结果 B 的"原因",而 $P(A_j)$表示各种"原因"发生的可能性的大小,称为**先验概率**;$P(A_j \mid B)$则是反映试验产生了事件 B 之后对各种"原因"概率的新认识,故常称为**后验概率**.

例 3 假定用血清甲胎蛋白法诊断肝癌.用 C 表示被检验者患有肝癌这一事件,用 A 表示被检验者为阳性反应这一事件.设 $P(A \mid C) = 0.95$, $P(A^c \mid C^c) = 0.90$. 若某人群中 $P(C) = 0.0004$,现有一人呈现阳性反应,求此人确为肝癌患者的概率 $P(C \mid A)$.

解 由贝叶斯公式,有

$$P(C \mid A) = \frac{P(C) P(A \mid C)}{P(C) P(A \mid C) + P(C^c) P(A \mid C^c)}$$

$$= \frac{0.0004 \times 0.95}{0.0004 \times 0.95 + 0.9996 \times 0.10} = 0.0038.$$

1.3.3 瓮模型

不少随机现象可以用**瓮模型**这个生动而方便的概型来描述和分析.

设有一个装有 r 个红球和 b 个黑球的瓮,随机地从中取出一球,然后将它放回;同时,加进 c 个与此同色的球及 d 个与此异色的球,其中 c 和 d 是固定的数,且可以是正整数、零和负整数.这种取放过程反复进行,瓮中球的成分与数量就会不断变化.

若记第 i 次取出黑球为事件 B_i,第 j 次取出红球为事件 R_j,则利用条件概率的乘法公式可算得有关事件的概率.例如,

$$P(B_1 R_2) = \frac{b}{b+r} \times \frac{r+d}{b+r+c+d},$$

$$P(B_1 B_2 B_3) = \frac{b}{b+r} \times \frac{b+c}{b+r+c+d} \times \frac{b+2c}{b+r+2c+2d}.$$

当 $c=0$, $d=0$ 时,就是有放回的抽样模型.

当 $c=-1$, $d=0$ 时,就是无放回的抽样模型.

当 $c>0$, $d=0$ 时,得到的就是波利亚(G. Polya)的传染病模型,它描述了每次传染后都将增加再传染的概率.可证明,这个模型有如下性质:

1° $$P(B_k) = \frac{b}{b+r}, \quad P(R_k) = \frac{r}{b+r} \qquad (k = 1, 2, \cdots);$$

2° 对于任意正整数 m 与 n, $m<n$,有

$$P(B_mB_n)=\frac{b(b+c)}{(b+r)(b+r+c)},\quad P(B_mR_n)=\frac{br}{(b+r)(b+r+c)};$$

3° 在 n 次抽取中,结果为 n_1 个黑球与 $n_2(n_2=n-n_1)$ 个红球的概率与其抽得红、黑球的次序无关,皆为

$$P(B_1\cdots B_{n_1}R_{n_1+1}\cdots R_n)=\frac{b(b+c)\cdots(b+n_1c-c)r(r+c)\cdots(r+n_2c-c)}{(b+r)(b+r+c)\cdots(b+r+nc-c)}.$$

当 $c=-1$, $d=1$ 时,得到的就是埃伦费斯特(P.T.Ehrenfest)的热分子交换模型,即在两个相通的容器内,分子的游动引起热量的不断交换.

当 $c=0$, $d>0$ 时,得到的就是安全运动模型,即每当发生事故后,安全检查就抓紧些,再发生事故的概率变小;反之,没有发生事故时,安全检查就可能放松一些,再发生事故的概率增大.

1.4 事件独立性

1.4.1 两事件独立性的定义

独立性是概率论独有的、极其重要的概念.从直观上说,两个事件独立的含义就是其中一个事件发生与否并不影响另一事件发生的概率.

定义 10 设$(\Omega,\mathscr{F},P)$为一概率空间,$A,B\in\mathscr{F}$,若

$$P(AB)=P(A)P(B),$$

则称事件 A 与 B **相互独立**,简称**独立**.

从上述定义可以得出如下结论:

1° 概率为 1 和概率为 0 的事件与任何事件都是独立的;

2° 若 A 与 B 独立,则 A 与 B^c, A^c 与 B, A^c 与 B^c 也都独立;

3° 若 $P(A)>0(P(B)>0)$,则 A 与 B 独立的充分必要条件为

$$P(B|A)=P(B),(P(A|B)=P(A)),$$

这正符合独立性的直观意义.

1.4.2 多个事件相互独立的定义

定义 11 设 $A_1,A_2,\cdots,A_n\in\mathscr{F}$,若对于在 $1,2,\cdots,n$ 中选取的所有可能的不同组合 $i_1,i_2,\cdots,i_r$,均有

$$P(\bigcap_{j=1}^{r}A_{i_j})=P(A_{i_1})P(A_{i_2})\cdots P(A_{i_r})\qquad(r=2,3,\cdots,n)$$

成立,则称这 n 个事件相互独立.

注意:n 个事件相互独立需要有 2^n-n-1 个等式来保证,并且这些等式不能相互推得.

如果无限多个事件中任意有限多个事件都是相互独立的,则称无限多个事件是相互独立的.

应该指出，如果若干个事件是相互独立的，那么其中任一部分事件的运算组合（并、交、补等）与其余部分事件的组合也是独立的．

1.4.3　独立随机试验

定义 12　设$(\Omega_0,\mathscr{F}_0,P_0)$和$(\Omega_1,\mathscr{F}_1,P_1)$分别表示$E_0$和$E_1$两个随机试验的概率空间；乘积空间

$$\Omega=\Omega_0\times\Omega_1=\{(\omega_0,\omega_1):\omega_0\in\Omega_0,\omega_1\in\Omega_1\}$$

表示依次考虑这两个试验时的基本空间；当$A_0\in\mathscr{F}_0$，$A_1\in\mathscr{F}_1$时，乘积事件

$$A=A_0\times A_1=\{(\omega_0,\omega_1):\omega_0\in A_0,\omega_1\in A_1\}$$

表示A_0和A_1依次发生的事件．如果

$$P(A)=P(A_0\times A_1)=P_0(A_0)P_1(A_1)$$

对于一切$A_0\in\mathscr{F}_0$，$A_1\in\mathscr{F}_1$都成立，则称这两个随机试验是相互独立的．

通俗地说，两个随机试验是独立的，是指其中一个试验发生的每个可能结果均不影响另一个试验任何结果的概率．假如第二个试验还是第一个试验的重复（即两个概率空间相同），则称为重复独立试验．

类似地，可以定义n个随机试验的相互独立性和n次以至无穷次重复独立试验，其基本空间分别记作$\Omega_0{}^n$和$\Omega_0{}^\infty$．

伯努利概型　它是最重要的重复独立试验的例子．这种随机试验的基本事件只有两个：成功（记为A）与失败（记为A^c）．例如检查一个产品是否合格，一台车床是否发生故障等．设在一次试验中A的概率为p，A^c的概率为$q=1-p$，那么在由n次试验构成的伯努利概型中，事件A发生k次的概率为

$$b_k=\binom{n}{k}p^kq^{n-k}\qquad(k=0,1,\cdots,n).$$

这是有名的**二项分布**，常记作$B(n,p)$．如果想像独立地让这一试验无限次地重复下去，则首次成功发生在第k次试验的概率为

$$g_k^{(1)}=pq^{k-1}\qquad(k=1,2,\cdots),$$

第r次成功发生在第k次试验的概率为

$$g_k^{(r)}=\binom{k-1}{r-1}p^rq^{k-r}\qquad(k=r,r+1,\cdots).$$

2　随机变量及其分布

2.1　随机变量

2.1.1　随机变量的定义

设$(\Omega,\mathscr{F},P)$为一概率空间．如果对于基本空间Ω中的每一基本结果ω，都有

一个实数 $X(\omega)$ 与之对应，那么 X 是定义于 Ω 上的一个实值函数．粗略地说，X 就称为一个随机变量．例如，掷两颗骰子出现的点数之和，由 n 次试验构成的伯努利概型中成功的次数，悬浮在液体中的微粒在单位时间内沿某一方向的位移，等等，都是随机变量．

在研究随机变量的性质时，确定和计算它取某个数值或落入某个数值区间内的概率是特别重要的，因此，它们应当属于事件 σ 域 $\mathscr{F}$．根据这样的直观想法，随机变量有如下严格的数学定义．

定义 1 设 $X=X(\omega),\omega\in\Omega$ 是 Ω 上的实值函数．如果对于任何实数 x，恒有

$$\{X\leqslant x\}\xlongequal{\text{def}}\{\omega\in\Omega:X(\omega)\leqslant x\}\in\mathscr{F},$$

则称 X 为（概率空间 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 上的）**随机变量**．在测度论中，也称这样的 X 为**可测函数**．

2.1.2 分布函数

定义 2 设 X 是 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 上的随机变量，对于任一实数 x，定义

$$F(x)=P\{X\leqslant x\},$$

则 F 是实数集 $\mathbf{R}=(-\infty,+\infty)$ 上的一个函数，称为 X 的**分布函数**，有时记作 $X\sim F$.

任何分布函数都满足以下三个条件：

1° 单调非降性　当 $a<b$ 时，$F(a)\leqslant F(b)$；

2° 右连续性　$\lim\limits_{x\to a^+}F(x)=F(a)$，其中 $x\to a^+$ 表示 $x>a$ 且趋近于 a；

3° 规范性　$\lim\limits_{x\to-\infty}F(x)=0,\quad \lim\limits_{x\to+\infty}F(x)=1.$

反之，任一满足这三个条件的函数必是某一随机变量的分布函数．

分布函数虽然是特殊事件 $\{X\leqslant x\}$ 的概率，但是由它可以算出 X 落入任一区间（以至任一可测集）的概率，例如，当 $a<b$ 时，

$$P\{a<X\leqslant b\}=F(b)-F(a),$$

$$P\{a\leqslant X\leqslant b\}=F(b)-F(a^-),$$

$$P\{a\leqslant X<b\}=F(b^-)-F(a^-),$$

$$P\{X>x\}=1-F(x),\cdots$$

其中 $F(a^-)=\lim\limits_{x\to a^-}F(x)$，$x\to a^-$ 表示 $x<a$ 且趋近于 a.

实践中常用的随机变量可分为两类，一类是离散随机变量，另一类是连续随机变量．它们取值的概率规律虽然可以用分布函数给出，但还可以用各自更直观、更方便的形式给出．这便是分布列和概率密度函数．

2.1.3 离散随机变量及其分布列

定义 3 只取有限个或可列个实数值的随机变量，称为**离散随机变量**．

理论上常见的一种离散随机变量是事件的**示性随机变量**或**指示函数** I_A．设 $A\in\mathscr{F}$，则

$$I_A(\omega)=\begin{cases}1 & (\omega\in A),\\ 0 & (\omega\in A^c).\end{cases}$$

它只取0和1两个值．

又如电话交换台单位时间内收到的呼叫次数 X 是一个可取全部非负整数值的离散随机变量．这类随机变量也称为**整值随机变量**．

定义 4 设离散随机变量 X 所取的全部值为 $\{x_1,x_2,\cdots,x_n,\cdots\}$，记事件 $\{X=x_i\}$ 的概率 $P\{X=x_i\}=p_i,i=1,2,\cdots$，则二元序列 $\{(x_i,p_i):i=1,2,\cdots,n,\cdots\}$ 表达了 X 取值的概率规律，称为 X 的**分布列**．它必然满足条件：

1° $p_i\geqslant 0,i=1,2,\cdots$；

2° $\sum\limits_{i\geqslant 1}p_i=1$.

知道了 X 的分布列，就可以写出它的分布函数 $F(x)$：

$$F(x)=P\{X\leqslant x\}=\sum_{x_i\leqslant x}p_i.$$

这是一个非降阶梯函数，它在每一 x_i 处有一个跃度为 p_i 的跳．

泊松分布 若整值随机变量 X 的分布列为

$$P\{X=k\}=\frac{\lambda^k}{k!}\exp(-\lambda)\qquad(k=0,1,2,\cdots).$$

其中 λ 为一正参数，则该分布称为泊松(S. D. Poisson)分布，记作 $P(\lambda)$．这是概率论中最常用的分布之一．例如电话交换台单位时间内收到的呼叫次数，显微镜下某区域中的白血球数等等，都服从泊松分布．

2.1.4 连续随机变量及其密度函数

定义 5 如果存在一非负实函数 $f(x),x\in\mathbf{R}$，使随机变量 X 的分布函数 $F(x)$ 可以表示成

$$F(x)=\int_{-\infty}^{x}f(y)\mathrm{d}y\qquad(x\in\mathbf{R}),$$

则称 X 为**连续随机变量**，f 称为 X 的**密度函数**．它必然满足条件：

1° $f(x)\geqslant 0,x\in\mathbf{R}$;

2° $\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\mathrm{d}x=1$.

连续随机变量 X 取任何一个实数值的概率等于0；当 $a<b$ 时，可以用密度函数在区间 $[a,b]$ 上的积分来计算事件 $\{a\leqslant X\leqslant b\}$ 的值：

$$P\{a\leqslant X\leqslant b\}=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x,$$

它等于实轴以上、密度函数曲线以下介于 $x=a$ 和 $x=b$ 两条垂直线之间的面积．

指数分布 若 X 是在 $[0,\infty]$ 中取值的连续随机变量，其密度函数为

$$f(x)=\lambda\exp(-\lambda x)\qquad(x\geqslant 0),$$

当 $x<0$ 时，$f(x)=0$，其中 λ 为一正参数，则由这种密度函数给定的分布称为指数分布，记作 $E(\lambda)$．例如许多耐用产品的寿命就服从指数分布．

正态分布 若 X 是在实轴 $\mathbf{R}$ 上取值的连续随机变量，其密度函数为

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\ \sigma}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\qquad(x\in\mathbf{R}),$$

其中 $-\infty<\mu<\infty,\sigma>0$ 是两个参数，则由这种密度函数给定的分布称为正态分布，又称为高斯(G.F.Gauss)分布，记作 $N(\mu,\sigma^2)$. 这是概率论中最重要的分布，生产与科学实验中许多随机变量的概率规律都可以近似地用它来描述，常用的概率分布中有一些是由它直接导出的．

2.2 随 机 向 量

2.2.1 随机向量的定义

有些随机现象需要同时用多个随机变量来描述．例如，为了研究地对空导弹爆炸点的位置，需要研究三维随机变量(X,Y,Z)；假如一个产品有 n 个质量指标，为了研究它们间的关系以提高质量，就需要研究 n 维随机变量．

定义 6 同一概率空间$(\Omega,\mathscr{F},P)$上的 n 个随机变量构成的 n 维向量 $\boldsymbol{X}=(X_1,X_2,\cdots,X_n)$称为 n 维**随机向量**，这时对于每一 $\omega\in\Omega$，有一个 n 维向量 $\boldsymbol{X}(\omega)$与之对应．随机变量可视为一维随机向量．

2.2.2 随机向量的分布函数

设 $\boldsymbol{X}$ 为$(\Omega,\mathscr{F},P)$上的 n 维随机向量．由随机变量的定义，对于任意 n 个实数 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，有

$$\{X_1\leqslant x_1,X_2\leqslant x_2,\cdots,X_n\leqslant x_n\}=\bigcap_{k=1}^{n}\{X_k\leqslant x_k\}\in\mathscr{F}.$$

定义 7 $\mathbf{R}^n$ 上的函数

$$F(\boldsymbol{x})=P\{X_1\leqslant x_1,X_2\leqslant x_2,\cdots,X_n\leqslant x_n\}=P\left(\bigcap_{k=1}^{n}\{X_k\leqslant x_k\}\right)$$
$$(\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)\in\mathbf{R}^n)$$

称为随机向量 $\boldsymbol{X}$ 的(n 元)分布函数，也称为 n 个随机变量 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 的**联合分布函数**．

n 元分布函数也有与一元情形相应的充分必要条件，但叙述较为复杂．其中最本质的一条是描述多元函数 F 的"单调非降性"：对于任何 n 对实数，$a_k<b_k$，$k=1,2,\cdots,n$，有

$$P\{a_1<X_1\leqslant b_1,\cdots,a_n<X_n\leqslant b_n\}=\sum_{\substack{c_k=a_k\text{或}b_k\\k=1,2,\cdots,n}}(-1)^{\lambda}F(c_1,c_2,\cdots,c_n)\geqslant 0.$$

这里求和号 $\sum$ 的含义是：每个 c_k 或取 a_k 或取 $b_k(k=1,2,\cdots,n)$，一共有 2^n 项，而 $\lambda=\lambda(c_1,c_2,\cdots,c_n)$依$(c_1,c_2,\cdots,c_n)$中 a_k 的个数为奇数或偶数而取 1 或 0. 例如，当 $n=1$ 时，对于 $a_1<b_1$，有

$$P\{a_1 < X_1 \leqslant b_1\} = F(b_1) - F(a_1) \geqslant 0;$$

当 $n = 2$ 时，对于 $a_1 < b_1, a_2 < b_2$，有

$$P\{a_1 < X_1 \leqslant b_1, a_2 < X_2 \leqslant b_2\} = F(b_1, b_2) - F(a_1, b_2) - F(b_1, a_2) + F(a_1, a_2) \geqslant 0.$$

由此看出，从 X 的分布函数可以定出 X 落入 $\mathbf{R}^n$ 中任一超长方体（以至任一可测集）中的概率．

此外，利用 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的联合分布函数，还可求得其中某一或某些随机变量的分布函数，它们被称为前者的**边缘分布函数**．求边缘分布函数的方法是在联合分布函数中把其余的变量用 ∞ 代替，然后求得．以两个随机变量 X_1, X_2 为例，设它们的联合分布函数为 $F(x_1, x_2)$，则 X_1, X_2 的两个边缘分布函数分别为

$$F_1(x_1) = \lim_{x_2 \to \infty} F(x_1, x_2) \qquad (x_1 \in \mathbf{R}),$$

$$F_2(x_2) = \lim_{x_1 \to \infty} F(x_1, x_2) \qquad (x_2 \in \mathbf{R}).$$

一般地，n 元联合分布有 n 个一元边缘分布，$\binom{n}{2}$ 个二元边缘分布，…，$\binom{n}{n-1} = n$ 个 $n-1$ 元边缘分布．但即使这些边缘分布函数全部都已知，一般也还不能确定其 n 元联合分布函数．

2.2.3 离散随机向量及多元分布列

定义 8 概率空间$(\Omega, \mathscr{F}, P)$上的 n 维随机向量 $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \cdots, X_n)$，如果它的每个分量 $X_k (k = 1, 2, \cdots, n)$都是离散随机变量，则称 $\boldsymbol{X}$ 为离散随机向量．

设 X_k 仅取有限个或可列个值 $\{x_{k_1}, x_{k_2}, \cdots\}$，记

$$p_{i_1, i_2, \cdots, i_n} = P\{X_1 = x_{1i_1}, X_2 = x_{2i_2}, \cdots, X_n = x_{ni_n}\}$$
$$(i_1, i_2, \cdots, i_n = 1, 2, \cdots),$$

则称 $\{((x_{1i_1}, x_{2i_2}, \cdots, x_{ni_n}); p_{i_1, i_2, \cdots, i_n}) : i_1, i_2, \cdots, i_n = 1, 2, \cdots\}$ 为 $\boldsymbol{X}$ 的（n 元）分布列或 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的**联合分布列**．它们满足：

1° $p_{i_1, i_2, \cdots, i_n} \geqslant 0$;

2° $\sum\limits_{i_n \geqslant 1} \cdots \sum\limits_{i_2 \geqslant 1} \sum\limits_{i_1 \geqslant 1} p_{i_1, i_2, \cdots, i_n} = 1.$

***n* 元多项分布** 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 都是只取 $0, 1, 2, \cdots, N$ 的随机变量．如果对于任意 n 个满足条件 $i_1 + i_2 + \cdots + i_n = N$ 的非负整数 $i_1, i_2, \cdots, i_n$，有

$$P\{X_1 = i_1, \cdots, X_n = i_n\} = \frac{N!}{i_1!\ i_2!\ \cdots i_n!} p_1^{i_1} p_2^{i_2} \cdots p_n^{i_n},$$

其中非负参数 $p_1, p_2, \cdots, p_n$ 满足条件 $p_1 + p_2 + \cdots + p_n = 1$，则称此分布列为 n 元多项分布．当 $n = 2$ 时即是二项分布．

2.2.4 连续随机变量及多元密度函数

定义 9 n 维随机向量 $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 称为连续随机向量．如果存在一个

n 元实函数$f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$,$(x_1,x_2,\cdots,x_n)\in\mathbf{R}^n$,使 X 的分布函数 F 可以表示成

$$F(x_1,x_2,\cdots,x_n)=\int_{-\infty}^{x_n}\cdots\int_{-\infty}^{x_2}\int_{-\infty}^{x_1}f(y_1,y_2,\cdots,y_n)\mathrm{d}y_1\mathrm{d}y_2\cdots\mathrm{d}y_n,$$

此时称 f 为X的(n 元)密度函数或 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 的**联合密度函数**. 它一定满足如下两条性质:

1° $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\geqslant 0$;

2° $\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int_{-\infty}^{+\infty}f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n=1$.

此时 X 落入 $\mathbf{R}^n$ 中任一区域D(超长方体以至可测集)内的概率可由如下 D 上的多重积分求得:

$$P\{X\in D\}=\int_D\cdots\int f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n.$$

如果随机变量 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 有联合密度函数f,那么其中某一个或某些个也必有(联合)密度函数,称这(联合)密度函数为 f 的**边缘密度函数**. 边缘密度函数可由 f 求出,其方法是令 f 中的其余变量依次在$(-\infty,+\infty)$上积分后求得. 以 $n=2$ 为例,X_1、X_2 各自的密度函数f_1 与f_2 与它们的二元联合密度函数f 的关系是:

$$f_1(x_1)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(x_1,x_2)\mathrm{d}x_2\qquad(x_1\in\mathbf{R}),$$

$$f_2(x_2)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(x_1,x_2)\mathrm{d}x_1\qquad(x_2\in\mathbf{R}).$$

n 元正态分布 其密度函数为

$$f(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}}\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\right)$$

$$(\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)\in\mathbf{R}),$$

其中 $\boldsymbol{\mu}\in\mathbf{R}^n$;$\boldsymbol{\Sigma}$ 是一个 n 阶正定对称矩阵,$|\boldsymbol{\Sigma}|$ 是它的行列式,它们是 n 元正态分布的参量. 通常记作 $N(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$. 这是最常用的多元分布.

可以证明,n 元正态密度函数的任何边缘密度函数也是正态的. 但有例子说明,即使边缘分布都是正态的,其联合分布也未必是正态分布.

2.3 独立性与条件分布

2.3.1 随机变量的独立性

与事件的独立性一样,**随机变量的独立性**也是概率论中一个十分重要的概念.

定义 10 设 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 是 n 个随机变量. 如果对于任何 n 个实数 $x_1,x_2,\cdots,x_n$,都有

$$P\{X_1\leqslant x_1,X_2\leqslant x_2,\cdots,X_n\leqslant x_n\}=P\{X_1\leqslant x_1\}P\{X_2\leqslant x_2\}\cdots P\{X_n\leqslant x_n\},$$

即它们的联合分布函数 $F(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 等于它们各自的分布函数 $F_1(x_1)$、$F_2(x_2)$,$\cdots$,$F_n(x_n)$的乘积:

$$F(x_1,x_2,\cdots,x_n)=F_1(x_1)F_2(x_2)\cdots F_n(x_n)\quad((x_1,x_2,\cdots,x_n)\in\mathbf{R}^n),$$

则称 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 相互独立,简称独立.

此时,对于任何 n 对实数 $a_k<b_k,k=1,2,\cdots,n$,有

$$P\{a_1<X_1\leqslant b_1,\cdots,a_n<X_n\leqslant b_n\}=\prod_{k=1}^{n}(F_k(b_k)-F_k(a_k))$$

成立;进一步,对于实轴 $\mathbf{R}$ 上的任何 n 个可测集 $B_1,B_2,\cdots,B_n$,有

$$P\{X_1\in B_1,X_2\in B_2,\cdots,X_n\in B_n\}=P\{X_1\in B_1\}P\{X_2\in B_2\}\cdots P\{X_n\in B_n\}.$$

如果 $g_k(x),k=1,2,\cdots,n$,是 n 个连续函数或初等函数(以至可测函数),则从 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 的独立性可推出 $g_1(X_1),g_2(X_2),\cdots,g_n(X_n)$ 也独立.

上述定义与性质可以直接推广到每一个 $X_k(k=1,2,\cdots,n)$ 为随机向量的情形.如果随机变量(向量)序列 $X_1,X_2,\cdots$ 中的任何有限个都独立,则称之为独立随机变量(向量)序列.

n 个事件 $A_1,A_2,\cdots,A_n$ 的独立性,等价于它们的示性随机变量 $I_{A_1},I_{A_2},\cdots,I_{A_n}$ 的独立性.

n 个离散(连续)随机变量相互独立的充分必要条件是其联合分布列(联合密度函数)等于其各自的分布列(密度函数)的乘积.例如,若 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 有 n 元正态分布密度函数,则它们独立的充分必要条件是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为一对角矩阵.

2.3.2 随机变量关于事件的条件分布

定义 11 设 X 是概率空间$(\Omega,\mathscr{F},P)$上的一个随机变量,$A\in\mathscr{F}$且 $P(A)>0$,则称

$$F(x|A)=P(\{X\leqslant x\}|A)=\frac{P(\{X\leqslant x\}\cap A)}{P(A)}\qquad(x\in\mathbf{R})$$

为 X 关于事件 A 的**条件分布函数**.这个定义可直接推广到 X 为随机向量的情形.

2.3.3 离散随机变量的条件分布列

定义 12 设 X,Y 是两个离散随机变量,其联合分布列为

$$P\{X=x_i,Y=y_j\}=p_{ij}\qquad(i,j=1,2,\cdots).$$

若对于给定的 y_j,有 $\sum_{i\geqslant1}p_{ij}>0$,则称

$$p_{i|j}=P(\{X=x_i\}|\{Y=y_j\})$$
$$=\frac{P(\{X=x_i\}\cap\{Y=y_j\})}{P\{Y=y_j\}}=\frac{p_{ij}}{\sum_{i\geqslant1}p_{ij}}\qquad(i=1,2,\cdots)$$

为 X 关于 $Y=y_j$ 的**条件分布列**.

2.3.4 连续随机变量的条件密度函数

定义 13 设 X,Y 是两个有联合密度函数$f(x,y),(x,y)\in\mathbf{R}^2$ 的连续随机变量.若对于给定的 y,有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y)\mathrm{d}x > 0,$$

则称

$$f(x \mid y) = \frac{f(x,y)}{f_Y(y)} = \frac{f(x,y)}{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y)\mathrm{d}x} \qquad (x \in \mathbf{R})$$

为 X 关于 $Y=y$ 的**条件密度函数**.

定义 12 和定义 13 也可直接推广到 X,Y 为随机向量(其维数不必相同)的情形.

例如,n 元正态分布中,若对 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}$ 作 $n=n_1+n_2$ 的分解:

$$\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2), \quad \boldsymbol{\mu}=(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2), \ \boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{12}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}\end{bmatrix},$$

则 $\boldsymbol{x}_1$ 关于 $\boldsymbol{x}_2$ 的条件分布也为正态分布,即

$$N(\boldsymbol{\mu}_1+(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}^{\mathrm{T}}).$$

2.4 随机变量函数的分布

2.4.1 一般原则

一个或多个随机变量的连续函数或初等函数(甚至更一般的实可测函数)仍然是随机变量,而且后者的分布由前者的分布完全确定.这一结论无论是在理论上还是在实际计算上都是重要的.

设 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 是概率空间$(\Omega,\mathscr{F},P)$上的 n 个随机变量,它们有联合分布函数 $F(x_1,x_2,\cdots,x_n)$,$(x_1,x_2,\cdots,x_n)\in\mathbf{R}^n$.又设 $g_j(x_1,x_2,\cdots,x_n)$,$j=1,2,\cdots,m$ 是 $\mathbf{R}^n$ 上的 m 个连续函数,记

$$Y_j=g_j(X_1,X_2,\cdots,X_n).$$

那么 $Y_1,Y_2,\cdots,Y_m$ 也都是$(\Omega,\mathscr{F},P)$上的随机变量,它们的联合分布函数

$$F_Y(y_1,y_2,\cdots,y_m)=P\{Y_1\leqslant y_1,Y_2\leqslant y_2,\cdots,Y_m\leqslant y_m\} \quad ((y_1,y_2,\cdots,y_m)\in\mathbf{R}^m),$$

由下面的积分公式给出:

$$F_Y(y_1,y_2,\cdots,y_m)=\int\cdots\int_{\left\{\substack{g_j(x_1,x_2,\cdots,x_n)\leqslant y_j \\ j=1,2,\cdots,m}\right\}} \mathrm{d}F(x_1,x_2,\cdots,x_n),$$

其中积分是对 F 的多重斯蒂尔切斯(T. Stieltjes)积分,被积函数是常数 1,积分号下的{ }表示随 $y_1,y_2\cdots,y_n$ 变动的积分区域.如果 F 还有密度函数 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$,那么上述积分中的 $\mathrm{d}F(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 就可代之以 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n$,而变成普通的(黎曼(G. F. B. Riemann))积分.若进一步假设 g_j 都是可微函数,那么在一定条件下可通过积分变元的变换求得 $Y_1,Y_2,\cdots,Y_m$ 的联合密度函数

$f_Y(y_1, y_2, \cdots, y_m)$.

2.4.2 单个随机变量的线性函数

设随机变量 X 的分布函数为 $F(x)(x \in \mathbf{R})$，a 及 b 为两实数，$a \neq 0$，则 $Y = aX + b$ 的分布函数

$$F_Y(y) = F\left(\frac{y-b}{a}\right) \qquad (y \in \mathbf{R}).$$

若 X 有密度函数 $f(x)$，则 Y 也有密度函数

$$f_Y(y) = f\left(\frac{y-b}{a}\right)\frac{1}{a} \qquad (y \in \mathbf{R}).$$

例如，$X \sim N(\mu, \sigma^2)$，则

$$Y = aX + b \sim N(a\mu + b, a^2\sigma^2).$$

2.4.3 单个随机变量的严格单调函数

设连续随机变量 X 的密度函数为 $f(x)$，$y = g(x)$ 是严格单调函数，其反函数 $x = h(y)$ 有连续导数 $h'(y)$，则 $Y = g(X)$ 也是一个连续随机变量，其密度函数为

$$f_Y(y) = \begin{cases} f(h(y))\,|h'(y)| & (\alpha < y < \beta), \\ 0 & (\text{其他}), \end{cases}$$

其中，$\alpha = \min\{g(-\infty), g(+\infty)\}$，$\beta = \max\{g(-\infty), g(+\infty)\}$.

例如，设随机变量 $X = \ln Y \sim N(\mu, \sigma^2)$，则 $Y = e^X$ 的密度函数为

$$f_Y(y) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma y}\exp\left\{-\dfrac{1}{2}\dfrac{(\ln y - \mu)^2}{\sigma^2}\right\} & (y > 0), \\ 0 & (y \leqslant 0), \end{cases}$$

常称之为**对数正态分布**，记作 $LN(\mu, \sigma^2)$.

2.4.4 两个随机变量之和、积、商

设随机变量 X 与 Y 有联合密度函数 $f(x, y)$，$(x, y) \in \mathbf{R}^2$，则 $Z_1 = X + Y$，$Z_2 = XY$ 及 $Z_3 = \dfrac{X}{Y}$（假定 $Y \neq 0$）都是连续随机变量，它们的密度函数分别为

$$f_{Z_1}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, z - x)\,dx,$$

$$f_{Z_2}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f\left(x, \frac{z}{x}\right)\frac{dx}{|x|},$$

$$f_{Z_3}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} |y|\,f(yz, y)\,dy.$$

特别地，当 X 与 Y 独立时，以上三式分别变为

$$f_{Z_1}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_X(x) f_Y(z - x)\,dx,$$

$$f_{Z_2}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_X(x) f_Y\left(\frac{z}{x}\right)\frac{dx}{|x|},$$

$$f_{Z_3}(z)=\int_{-\infty}^{+\infty}|y|f_X(yz)f_Y(y)\mathrm{d}y.$$

此时,常称 f_{Z_1} 为 f_X 与 f_Y 的卷积,记作

$$f_{Z_1}=f_X*f_Y.$$

例 设 X,Y 为独立随机变量,且有相同的指数分布密度函数 $f(x)=e^{-x}$, $x\geqslant 0$.求随机变量 $U=X+Y,V=\frac{X}{Y}$ 的联合密度函数 $g(u,v)$.

解 对 $u\geqslant 0,v\geqslant 0$ 作变换,

$$u=x+y,v=\frac{x}{y},$$

因此

$$x=\frac{uv}{1+v},\quad y=\frac{u}{1+v}.$$

易算出其变换雅可比(C.G.J.Jacobi)行列式为

$$|J|=\frac{u}{(1+v)^2}\qquad (u,v\geqslant 0),$$

所以有

$$g(u,v)=f(x)f(y)|J|=e^{-u}\frac{u}{(1+v)^2}=ue^{-u}\frac{1}{(1+v)^2}.$$

因而 U 与 V 是独立的,且分别有密度函数 ue^{-u} 和 $\frac{1}{(1+v)^2}$.

3 数字特征与特征函数

所谓数字特征,是指刻画随机变量及其分布的宏观特性的各种数值.

3.1 期 望

3.1.1 期望的定义

随机变量的期望,又称**均值**.它是随机变量按其取值概率的加权平均,表征其概率分布的中心位置.它是概率论发展早期就已产生的一个重要概念.

定义 1 设 X 是概率空间$(\Omega,\mathscr{F},P)$上的一个随机变量.用测度论的术语说,X 的期望 EX,就是 X 在空间 Ω 上对概率测度 P 的积分,记作

$$EX=\int_\Omega X\mathrm{d}P.$$

要注意的是,这个积分不一定存在(有意义).只有当

$$E|X|=\int_\Omega|X|\mathrm{d}P<\infty$$

时，EX 才存在且为一个有穷实数．这个实数就称为 X 的**期望**．期望有穷的 X 称为**可积随机变量**．

若 $\boldsymbol{X}=(X_1,X_2,\cdots,X_n)$ 为 n 维随机向量，且每个分量都可积，则定义

$$E\boldsymbol{X}=(EX_1,EX_2,\cdots,EX_n).$$

期望的上述定义在理论上是有巨大价值的，但如果要算出它的具体结果，则需要应用下面的各个公式．设 $F(x)$ 是可积随机变量 X 的分布函数，那么

$$EX=\int_{-\infty}^{+\infty}x\mathrm{d}F(x)$$

其中积分是 x 对 F 的斯蒂尔切斯积分．如果 X 还是有密度函数 $f(x)$ 的连续随机变量，那么

$$EX=\int_{-\infty}^{+\infty}xf(x)\mathrm{d}x.$$

如果 X 是有分布列 $\{(x_i,p_i):i=1,2,\cdots\}$ 的离散随机变量，那么

$$EX=\sum_{i\geqslant 1}x_ip_i.$$

例1 设 X 服从二项分布 $B(n,p)$，即

$$P\{X=k\}=b_k=\binom{n}{k}p^kq^{n-k}\qquad(k=0,1,2,\cdots,n;q=1-p),$$

则

$$EX=\sum_{k=0}^{n}k\binom{n}{k}p^kq^{n-k}=np.$$

例2 设 X 服从泊松分布 $P(\lambda)$，则

$$EX=\sum_{k=0}^{\infty}k\frac{\lambda^k}{k!}\mathrm{e}^{-\lambda}=\lambda.$$

例3 设 X 服从正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$，则

$$EX=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}x\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\mathrm{d}x=\mu.$$

例4 设 X 服从**柯西**(A. L. Cauchy)**分布** $C(1,0)$，即有密度函数 $f(x)=\frac{1}{\pi}\frac{1}{1+x^2}$，则其数学期望不存在．

3.1.2 期望的性质

期望有以下性质(其中涉及的随机变量都假定为可积随机变量)：

1° 若把常数 C 视为随机变量，则有 $EC=C$.

2° 对于任意 $A\in\mathscr{A}$，有

$$EI_A=P(A).$$

3° 对于任意常数 c,d 和随机变量 X,Y，有

$$E(cX+dY)=cEX+dEY.$$

4° 若 $X\geqslant 0$，则 $EX\geqslant 0$.

5° 若 X 与 Y 相互独立，则

$$E(XY)=(EX)(EY).$$

6° 设随机变量 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 有联合分布函数 $F(x_1,x_2,\cdots,x_n)$,$(x_1,x_2,\cdots,x_n)\in\mathbf{R}^n$,$g$ 为 $\mathbf{R}^n$ 上的连续(或可测)函数,$Y=g(X_1,X_2,\cdots,X_n)$.若 Y 为可积随机变量,$F_Y(y)$ 为其分布函数,则

$$EY=\int_{-\infty}^{+\infty}y\mathrm{d}F_Y(y)=\int_{\mathbf{R}^n}\cdots\int g(x_1,x_2,\cdots,x_n)\mathrm{d}F(x_1,x_2,\cdots,x_n).$$

若 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 有联合密度函数 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$,则上式积分中的 $\mathrm{d}F(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 可更换成 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n$.若 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 有联合分布列,则上式可更换成对分布列的加权多重和.

性质 6°表明,求随机变量函数的期望,并不需先求出该函数的分布,可利用原始的分布求得.这将大大地简化计算.

此外,作为概率空间上对概率测度的积分,随机变量序列的期望还具有优越的收敛性质(见本篇第 4 章).

3.2 方差与协方差

3.2.1 方差

定义 2 设 X 为一可积随机变量,则随机变量 $(X-EX)^2$ 的期望 $E(X-EX)^2$ 称为 X 的**方差**,它表示 X 与其期望 EX 之间的平均偏离程度或散布程度,记作 $\mathrm{var}(X)$ 或 $D(X)$.

视不同场合,设 X 的分布函数、密度函数、分布列分别为 $F(x)$,$f(x)$,$\{(x_i,p_i)\}$,记 $EX=\mu$,则 $\mathrm{var}(X)$ 可按下式求得:

$$\begin{aligned}\mathrm{var}(X)&=\int_{-\infty}^{+\infty}(x-\mu)^2\mathrm{d}F(x)\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}(x-\mu)^2f(x)\mathrm{d}x=\sum_{i\geqslant1}(x_i-\mu)^2p_i.\end{aligned}$$

为了与 X 的量纲一致,有时也用方差的平方根 $\sqrt{\mathrm{var}(X)}$ 来表示偏离程度,称为 X 的**标准差**.又称 $\dfrac{\sqrt{\mathrm{var}(X)}}{EX}$ 为**变异系数**.

由于随机变量的期望、方差和标准差都由其分布唯一确定,所以也称其为对应分布的期望、方差和标准差.

例 5 正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$ 的方差为

$$\mathrm{var}(X)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}(x-\mu)^2\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\mathrm{d}x=\sigma^2.$$

例 6 泊松分布 $P(\lambda)$ 的方差为

$$\mathrm{var}(X)=\sum_{k=0}^{\infty}(k-\lambda)^2\frac{\lambda^k}{k!}\mathrm{e}^{-\lambda}=\lambda.$$

方差有以下一些基本性质:

1° $\mathrm{var}(X)=EX^2-(EX)^2$.

2° 随机变量 X 的方差为 0 的充分必要条件是,存在常数 c 使 $P\{X=c\}=1$.

3° 对于任意常数 a,有

$$\mathrm{var}(aX)=a^2\mathrm{var}(X).$$

4° 对于任意常数 a,有

$$\mathrm{var}(X)\leqslant E(X-a)^2,$$

且仅当 $a=EX$ 时等式才成立.

5° 若 X 与 Y 独立,则

$$\mathrm{var}(X\pm Y)=\mathrm{var}(X)+\mathrm{var}(Y).$$

3.2.2 协方差与相关系数

定义 3 设 X 与 Y 是两个可积随机变量,其联合分布函数为 $F(x,y),(x,y)\in\mathbf{R}^2$,则在 XY 也为可积的条件下,定义

$$\begin{aligned}\mathrm{cov}(X,Y)&=E((X-EX)(Y-EY))\\&=E(XY)-(EX)(EY)\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}xy\,\mathrm{d}F(x,y)-(EX)(EY).\end{aligned}$$

$\mathrm{cov}(X,Y)$称为 X 与 Y 的**协方差**.显然有

$$\mathrm{cov}(X,X)=\mathrm{var}(X).$$

协方差常用来刻画两个随机变量之间线性联系的程度.为了消除不同量纲的影响,对于方差不为 0 的随机变量,常用它们的标准差加以标准化(即使其方差为 1).

定义 4 称

$$\rho_{XY}=\frac{\mathrm{cov}(X,Y)}{\sqrt{(\mathrm{var}(X))(\mathrm{var}(Y))}}=E\left(\frac{X-EX}{\sqrt{\mathrm{var}(X)}}\frac{Y-EY}{\sqrt{\mathrm{var}(Y)}}\right)$$

为 X 与 Y 的**相关系数**.

一般地,$|\rho_{XY}|\leqslant 1$.$|\rho_{XY}|=1$ 的充分必要条件是 X 与 Y 之间以概率 1 存在着线性关系,即存在常数 a,b,c,使 $P\{aX+bY=c\}=1$.当 $\rho_{XY}=0$,即 $\mathrm{cov}(X,Y)=0$ 时,称 X 与 Y 为不相关.此时,有

$$E(XY)=(EX)(EY),$$

$$\mathrm{var}(X\pm Y)=\mathrm{var}X+\mathrm{var}Y.$$

当 $\rho_{XY}\neq 0$ 时,X 与 Y 之间存在某种程度的线性联系;$|\rho_{XY}|$越接近于 1,线性联系的程度越密切.ρ_{XY}的正负性则表示这种线性联系是正向的还是反向的.

此外,若 X 与 Y 独立,则 X 与 Y 不相关.但反之一般不成立.

3.2.3 协方差阵

定义 5 设 $\boldsymbol{X}=(X_1,X_2,\cdots,X_n)$为一 n 维随机向量,它的每一分量都有有穷的期望和方差.记 n 阶矩阵

$$\mathrm{var}(\boldsymbol{X})=E[(\boldsymbol{X}-E\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}-E\boldsymbol{X})]$$

$$=[\mathrm{cov}(X_i,X_j)] \qquad (i,j=1,2,\cdots,n)$$

称之为 X 的**协方差阵**或**方差阵**．它是一个半正定对称阵，即对于任意 n 个实数 $a_1,a_2,\cdots,a_n$，有

$$\sum_{i,j=1}^{n} a_i a_j \mathrm{cov}(X_i,X_j) \geqslant 0.$$

设 C 为一 $n\times m$ 实矩阵，则 XC 为 m 维随机向量，且

$$E(XC)=(EX)C, \quad \mathrm{var}(XC)=C^{\mathrm{T}}(\mathrm{var}(X))C.$$

例 7 设 n 维随机向量 X 服从正态分布 $N(\mu,\Sigma)$，则

$$EX=\mu, \quad \mathrm{var}(X)=\Sigma.$$

注意，这时 X 的各分量 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 不相关，与独立的条件是相同的，即 Σ 为对角阵，亦即当 $i\neq j$ 时，

$$\mathrm{cov}(X_i,X_j)=0.$$

3.3 矩与分位数

下面在讨论诸随机变量的期望时，如未加说明，总假定这个期望值是存在的．

3.3.1 随机变量的矩

定义 6 设 X 为一随机变量，k 为非负整数，r 为非负实数，则 EX^k，$E(X-EX)^k$，$E|X|^r$，$E|X-EX|^r$ 分别称为 X 的 k 阶**(原点)矩**，k 阶**中心矩**，r 阶**(原点)绝对矩**，r 阶**中心绝对矩**．

矩是期望与方差的推广，期望就是一阶原点矩，方差就是二阶中心矩．一般记

$$\mu_k=EX^k, \quad \nu_k=E(X-EX)^k \qquad (k=0,1,2,\cdots),$$

它们之间的关系为

$$\nu_k=\sum_{i=0}^{k}\binom{k}{i}(-\mu_1)^{k-i}\mu_i,$$

$$\mu_k=\sum_{i=0}^{k}\binom{k}{i}\nu_{k-i}\mu_1^i.$$

例 8 设 $X\sim N(0,\sigma^2)$，则

$$\mu_k=\nu_k=\begin{cases}0 & (k\text{ 为奇数}),\\ \sigma^k(k-1)(k-3)\cdots 1 & (k\text{ 为偶数}).\end{cases}$$

3.3.2 有关矩的不等式

(1)**柯西－施瓦兹(Cauchy-Schwarz)不等式**

$$|E(XY)|\leqslant E|XY|\leqslant\sqrt{EX^2}\sqrt{EY^2},$$

$$|\mathrm{cov}(X,Y)|\leqslant\sqrt{\mathrm{var}(X)}\sqrt{\mathrm{var}(Y)}.$$

(2)**赫尔德(O. Holder)不等式** 设 $r>1,\frac{1}{r}+\frac{1}{s}=1$，则

$$E|XY|\leqslant(E|X|^r)^{1/r}(E|Y|^s)^{1/s}.$$

(3)**闵可夫斯基(H. Minkowski)不等式** 设 $r\geqslant1$,则

$$(E|X+Y|^r)^{1/r}\leqslant(E|X|^r)^{1/r}+(E|Y|^r)^{1/r}.$$

(4)设 $1\leqslant r<s$,则

$$(E|X|^r)^{1/r}\leqslant(E|X|^s)^{1/s}.$$

(5)**詹森(J. L. W. Jensen)不等式** 设 g 是 $\mathbf{R}$ 上的一个凸函数,即对于任意 $0<p<1$,有

$$g(px+(1-p)y)\leqslant pg(x)+(1-p)g(y)$$

成立,则

$$g(EX)\leqslant Eg(X).$$

3.3.3 混合矩

定义 7 设 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 是 n 个随机变量,$k_1,k_2,\cdots,k_n$ 是 n 个非负整数,记 $k=k_1+k_2+\cdots+k_n$,则 $E(X_1^{k_1}X_2^{k_2}\cdots X_n^{k_n})$ 称为 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 的 k **阶混合(原点)矩**;如果把 X_j 都换成 $X_j-EX_j(j=1,2,\cdots,n)$,则称为 k **阶混合中心矩**. 协方差 $\mathrm{cov}(X,Y)$ 就是 X 与 Y 的二阶混合中心矩.

3.3.4 分位数

定义 8 设 X 为一随机变量,其分布函数为 $F(x)$,$x\in\mathbf{R}$.如果实数 $x_{0.5}$ 同时满足条件

$$F(x_{0.5})=P\{X\leqslant x_{0.5}\}\geqslant0.5$$

和

$$1-F(x_{0.5}-)=P\{X\geqslant x_{0.5}\}\geqslant0.5,$$

则 $x_{0.5}$ 称为 X 的**中位数**,有时也记作 m_X.

中位数对于任何随机变量都是存在的,但可能不唯一. 它是反映随机变量取值中心的一个数值. 在理论上,特别对于期望不存在的情况,它可以起到类似于期望的作用. 在统计问题中,它的一个主要优点是受样本极端值的影响较小.

将中位数的概念加以推广,可以引进数理统计学中常用的分位数的概念.

定义 9 设 $0<\alpha<1$,随机变量 X 的上 α **分位数**是指同时满足以下两条件的实数 x_α:

$$P\{X\leqslant x_\alpha\}\geqslant1-\alpha,\quad P\{X\geqslant x_\alpha\}\geqslant\alpha.$$

中位数就是 $\frac{1}{2}$ 分位数. $x_{1-\alpha}$ 又称为 X 的下 α **分位数**.

3.4 特征函数与母函数

3.4.1 特征函数的定义

定义 10 设 X 为一随机变量,则复值函数 $\varphi(t)=E\exp(\mathrm{i}tX)$ $(t\in\mathbf{R})$ 称为 X

的特征函数,其中 $i=\sqrt{-1}$.

根据不同场合,设 X 的分布函数、密度函数和分布列分别为 $F(x)$,$f(x)$ 和 $\{(x_j,p_j):j=1,2,\cdots\}$,则 $\varphi(t)$ 可分别表示为

$$\varphi(t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\mathrm{i}tx)\mathrm{d}F(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\mathrm{i}tx)f(x)\mathrm{d}x=\sum_{j\geq 1}\exp(\mathrm{i}tx_j)p_j.$$

因为 φ 是由 X 的分布函数 F 唯一确定的,所以 φ 也称为该分布的特征函数.事实上,φ 就是 F 的傅里叶-斯蒂尔切斯(Fourier-Stieltjes)变换,或其密度函数 f 的傅里叶变换.它对于任何随机变量都存在.

例 9 泊松分布 $P(\lambda)$ 的特征函数为

$$\varphi(t)=\exp(\lambda(\exp(\mathrm{i}t)-1)).$$

例 10 正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$ 的特征函数为

$$\varphi(t)=\exp(\mathrm{i}\mu t-\frac{\sigma^2t^2}{2}).$$

3.4.2 特征函数的基本性质

1° $\varphi(0)=1,|\varphi(t)|\leqslant 1\qquad(t\in\mathbf{R})$.

2° φ 在 $\mathbf{R}$ 上一致连续.

3° φ 是 $\mathbf{R}$ 上的半正定函数,即对于每一正整数 n 及任意 n 个实数 $t_1,t_2,\cdots,t_n$ 和复数 $z_1,z_2,\cdots,z_n$,都有

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\varphi(t_k-t_l)z_k\bar{z}_l\geqslant 0.$$

反之,满足1°,2°,3°三个性质的 φ 一定是某个分布的特征函数.

4° 若随机变量 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 是独立的,则其和的特征函数等于各加项的特征函数之积,即

$$\varphi_{X_1+X_2+\cdots+X_n}(t)=\varphi_{X_1}(t)\varphi_{X_2}(t)\cdots\varphi_{X_n}(t).$$

这一性质在研究独立随机变量之和的极限定理中有着重大的作用.

5° 若 a 与 b 为常数,则 $aX+b$ 与 X 的特征函数的关系为

$$\varphi_{aX+b}(t)=\exp(\mathrm{i}bt)\varphi_X(at).$$

6° 设 X 的 r 阶绝对矩有穷,则对于一切正整数 $k\leqslant r$,X 的特征函数 φ 的 k 阶导数存在、连续,且有

$$\varphi^{(k)}(t)=\mathrm{i}^k\int_{-\infty}^{+\infty}x^k\exp(\mathrm{i}tx)\mathrm{d}F(x),$$

因而有

$$\mu_k=EX^k=\mathrm{i}^{-k}\varphi^{(k)}(0).$$

此时,令

$$\kappa_k=\mathrm{i}^{-k}\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}t^k}(\ln\varphi(t))_{t=0}\qquad(k\leqslant r).$$

κ_k 称为 X 的 k 阶半不变量.

$$\kappa_1 = EX = \mu_1,$$
$$\kappa_2 = \mathrm{var}(X) = \mu_2 - \mu_1^2,$$
$$\kappa_3 = \mu_3 - 3\mu_1\mu_2 + 2\mu_1^3,$$
$$\cdots\cdots$$

7° 特征函数 φ 与其分布函数 F 相互唯一决定．实际上，对于 F 的一切连续点 x_1, x_2，成立如下的反演公式：

$$F(x_2) - F(x_1) = \frac{1}{2\pi}\lim_{T\to\infty}\int_{-T}^{T}\frac{\exp(-\mathrm{i}tx_1) - \exp(-\mathrm{i}tx_2)}{\mathrm{i}t}\varphi(t)\mathrm{d}t.$$

8° **连续性定理** 分布函数序列 $\{F_n(x)\}$ 在分布函数 $F(x)$ 的所有连续点上收敛于 $F(x)$，其充分必要条件是，相应的特征函数序列 $\{\varphi_n(t)\}$ 点点收敛于特征函数 $\varphi(t)$，且在 t 的任一有限区间上一致收敛（作为充分条件时，只须点点收敛的极限函数 φ 在 $t=0$ 处连续，φ 便一定是一个特征函数）．这是解决中心极限问题的一个关键性定理．

3.4.3 多元特征函数

定义 11 设 $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 为一 n 维随机向量，则 n 元复值函数

$$\varphi(t_1, t_2, \cdots, t_n) = E(\exp(\mathrm{i}\sum_{j=1}^{n} t_j X_j)) \qquad (\boldsymbol{t} = (t_1, t_2, \cdots, t_n) \in \mathbf{R}^n)$$

称为 $\boldsymbol{X}$ 的 n 元特征函数．

多元特征函数有与一元特征函数相类似的基本性质、反演公式及连续性定理．此外还有

1° $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 相互独立的充分必要条件是，对于任意 $(t_1, t_2, \cdots, t_n) \in \mathbf{R}^n$，

$$\varphi(t_1, t_2, \cdots, t_n) = \varphi_{X_1}(t_1)\varphi_{X_2}(t_2)\cdots\varphi_{X_n}(t_n).$$

2° 若 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的 $k = k_1 + k_2 + \cdots + k_n$ 阶混合矩存在，则

$$E(X_1^{k_1} X_2^{k_2} \cdots X_n^{k_n}) = (-\mathrm{i})^k \frac{\partial^k \varphi(0,0,\cdots,0)}{\partial t_1^{k_1}\partial t_2^{k_2}\cdots\partial t_n^{k_n}}.$$

例 11 n 元正态分布 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 的特征函数为

$$\varphi(\boldsymbol{t}) = \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{t}\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}} - \frac{1}{2}\boldsymbol{t}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{t}^{\mathrm{T}}).$$

注意，当 n 元正态分布用它的特征函数来表示时，比用它的密度函数来表示条件更宽些．这时它的协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 不必要求是（严格）正定的，而可以是半正定的．这样就把退化的 n 元正态分布也包括进来了．

3.4.4 概率母函数

定义 12 设 X 是只取非负整数值的离散随机变量，若其分布列

$$P\{X = k\} = p_k \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots),$$

则称

$$P(s) = Es^X = \sum_{k\geq 0} p_k s^k \qquad (|s| \leqslant 1)$$

出,首先,若用某随机变量 Y 的取值来作为"条件",当这些值改变时,X 关于这些"条件"的条件期望应是这些值的一个函数,也可以说,对于给定的随机变量 X,条件期望 $E(X|Y)$ 是随机变量 Y 的函数;其次,容易证明,对于 Y 的任一有界可测函数 $g(Y)$,必成立

$$E[E(X|Y)g(Y)]=E[Xg(Y)].$$

由此,条件期望有如下定义:

定义 13 设 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 为一概率空间,X 是其上的一个可积随机变量,$\boldsymbol{Y}$ 是其上的一个 n 维随机向量,那么,X 关于 $\boldsymbol{Y}$ 的**条件期望** $E(X|\boldsymbol{Y})$ 满足以下两个条件:

1° $E(X|\boldsymbol{Y})$ 是 $\boldsymbol{Y}$ 的一个可测函数;

2° 对于任一 n 元有界实值可测函数 $g(\boldsymbol{Y})$,成立

$$E[E(X|\boldsymbol{Y})g(\boldsymbol{Y})]=E[Xg(\boldsymbol{Y})].$$

测度论中的拉东-尼科迪姆(Radon-Nikodym)定理保证了满足这两个条件的随机变量 $E(X|\boldsymbol{Y})$ 一定存在,而且除在一个零概率事件上容许有差异外,$E(X|\boldsymbol{Y})$ 还是唯一确定的(称为以概率 1 唯一,或几乎必然唯一).

按这一定义,设 $A\in\mathscr{F}$,则有

$$E(X|I_A)=E(X|A)I_A+E(X|A^c)I_{A^c}.$$

对于任一 $B\in\mathscr{F}$,记

$$E(I_B|\boldsymbol{Y})=P(B|\boldsymbol{Y}),$$

称 $P(B|\boldsymbol{Y})$ 为 B 关于 $\boldsymbol{Y}$ 的条件概率.

这个定义还可进一步推广,此处不再赘述.

条件期望的概念对于现代概率论,尤其是随机过程理论,是十分重要的.

3.5.2 条件期望的性质

条件期望有以下性质(都以概率 1 成立):

1° 对于任意常数 c_1,c_2 和可积随机变量 X_1,X_2,有

$$E(c_1X_1+c_2X_2|\boldsymbol{Y})=c_1E(X_1|\boldsymbol{Y})+c_2E(X_2|\boldsymbol{Y}).$$

2° 若 $X\geqslant 0$,则 $E(X|\boldsymbol{Y})\geqslant 0$.

3° $E(Xg(\boldsymbol{Y})|\boldsymbol{Y})=E(X|\boldsymbol{Y})g(\boldsymbol{Y})$.

4° $E(E(X|\boldsymbol{Y}))=EX$.

5° 若 X 与 $\boldsymbol{Y}$ 独立,则

$$E(X|\boldsymbol{Y})=EX.$$

6° 对于任意 $A\in\mathscr{F}$,有

$$0\leqslant P(A|\boldsymbol{Y})\leqslant 1;\quad P(\Omega|\boldsymbol{Y})=1.$$

对于互不相容的事件列 $\{A_k\}_{k\geqslant 1}$,有

$$P\left(\bigcup_{k=1}^{\infty}A_k\mid\boldsymbol{Y}\right)=\sum_{k=1}^{\infty}P(A_k\mid\boldsymbol{Y}).$$

条件期望还有与期望类似的收敛定理.

3.5.3 条件独立性

定义 14 设 $A,B\in\mathscr{F}$,Y 是一随机向量,如果以概率 1 成立

$$P(AB\mid Y)=P(A\mid Y)P(B\mid Y),$$

则称 A 与 B 关于 Y **是条件独立的**.

可以证明,上式等价于以概率 1 成立

$$P(A\mid I_B,Y)=P(A\mid Y),$$

或

$$P(B\mid I_A,Y)=P(B\mid Y).$$

4 极限定理

4.1 概率论中的收敛

4.1.1 随机变量序列的收敛

设$\{X_n,n\geqslant 1\}$是概率空间$(\Omega,\mathscr{F},P)$上的随机变量序列. 概率论中经常用到的收敛概念有如下几种:

(1) 以概率 1 收敛 若

$$P\{\lim_{n\to\infty}X_n=X\}=1,$$

则称$\{X_n,n\geqslant 1\}$**以概率 1 收敛**于 X. 以概率 1 收敛也常称为**几乎必然收敛**,记作

$$\lim_{n\to\infty}X_n=X\qquad(\text{a.s.})$$

或

$$X_n\xrightarrow{\text{a.s.}}X.$$

(2) 依概率收敛 若对于任一正数 ε,都成立

$$\lim_{n\to\infty}P\{|X_n-X|\geqslant\varepsilon\}=0,$$

则称$\{X_n,n\geqslant 1\}$**依概率收敛**于 X,记作

$$X_n\xrightarrow{\text{in}P}X.$$

它表明随机变量 X_n 与 X 发生任意确定的正偏差的概率,都随着 n 的无限增大而趋于 0.

(3) r 阶平均收敛 对于 $r\geqslant 1$,若 X_n-X 的 r 阶绝对矩的极限

$$\lim_{n\to\infty}E|X_n-X|^r=0,$$

则称$\{X_n,n\geqslant 1\}$**r 阶平均收敛**于 X. 特别地,当 $r=1$ 时称为**平均收敛**;$r=2$ 时称为**均方收敛**.

(4) 依分布收敛 设 F_n, F 分别表示随机变量 X_n, X 的分布函数．若对于 F 的每一个连续点 x,都有

$$\lim_{n\to\infty} F_n(x) = F(x),$$

则称 X_n 的分布 F_n 弱收敛于 X 的分布 F,也称 X_n 依分布收敛于 X.

4.1.2 各种收敛的蕴含关系

用记号 $A \Rightarrow B$ 表示“由 A 可推出 B”．设 $r' \geqslant r \geqslant 1$,则以上各种收敛之间的蕴含关系如图 4-1 所示．

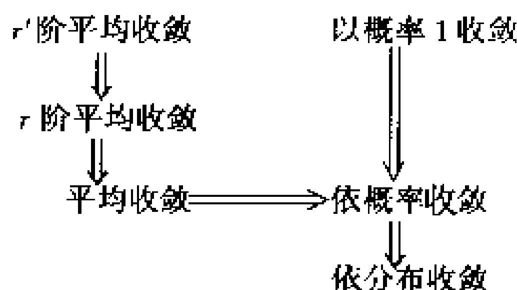


图 4-1

此外,X_n 以概率 1 收敛于 X 与 $Y_n = \sup_{j\geqslant n} |X_j - X|$ 依概率收敛于 0 是等价的．依概率收敛于一常数与依分布收敛于此常数是等价的．当 $X_n = \sum_{j=1}^{n} Y_j$ 是独立随机变量序列 $\{Y_n, n \geqslant 1\}$ 的部分和时,X_n 依分布收敛、依概率收敛和以概率 1 收敛这三者是等价的．

4.2 概率不等式与收敛定理

4.2.1 常用概率不等式

(1)**切比雪夫(T.L.Chebyshev)不等式** 设 X 为一可积随机变量,则对于任何 $\varepsilon > 0$,成立

$$P\{|X - EX| \geqslant \varepsilon\} \leqslant \frac{\text{var}(X)}{\varepsilon^2}.$$

(2)**科尔莫戈罗夫不等式** 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 是 n 个相互独立的随机变量,且 $EX_k = 0$, $\text{var}(X_k) = \sigma_k^2 < \infty$, $k = 1,2,\cdots,n$,则对于任何 $\varepsilon > 0$,成立

$$P\{\max_{1\leqslant k\leqslant n} |X_1 + X_2 + \cdots + X_k| \geqslant \varepsilon\} \leqslant \frac{1}{\varepsilon^2}(\sigma_1{}^2 + \sigma_2{}^2 \cdots + \sigma_n{}^2).$$

(3)**莱维(P.Levy)不等式** 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 是 n 个相互独立的随机变量．用 $m(X)$ 表示随机变量 X 的中位数,则对于任何 $\varepsilon > 0$,成立

$$P\{\max_{1\leqslant k\leqslant n} |X_1 + X_2 + \cdots + X_k + m(X_{k+1} + X_{k+2} + \cdots + X_n)| \geqslant \varepsilon\}$$
$$\leqslant 2P\{|X_1 + X_2 + \cdots + X_n| \geqslant \varepsilon\}.$$

这一不等式的特点是不要求存在有限的期望与方差.

4.2.2 博雷尔-坎泰利引理和0-1准则

博雷尔-坎泰利(Borel-Cantelli)引理 设$\{A_n, n\geq 1\}\subset\mathscr{F}$为一事件序列,则由$\sum_{n=1}^{\infty}P(A_n)<\infty$可以推出$\{A_n\}$中有无穷个同时发生的概率为0,即

$$P(\bigcap_{n=1}^{\infty}\bigcup_{j=n}^{\infty}A_j)=0.$$

博雷尔(E.Borel)0-1准则 设$\{A_n, n\geq 1\}$是相互独立的事件序列,则对应于级数$\sum_{n=1}^{\infty}P(A_n)$收敛或发散,$\{A_n\}$中有无穷多个同时发生的概率分别为0或1.

上述引理和准则是证明各种以概率1成立的命题的有力工具.

4.2.3 有关期望的收敛定理

设$\{X_n, n\geq 1\}$是概率空间$(\Omega,\mathscr{F},P)$上的随机变量序列.下面是经常用到的三个有关期望的收敛定理.

列维(E.E.Levi)单调收敛定理 若几乎必然成立$0\leq X_n\uparrow X$(即X_n非负且a.s.单调上升趋于X),则

$$EX_n\uparrow EX.$$

法图(P.Fatou)引理 若存在可积随机变量Y,使对于一切$n\geq 1$,几乎必然成立$X_n\geq Y$,则

$$E(\varliminf_{n\to\infty}X_n)\leq\varliminf_{n\to\infty}EX_n.$$

这里$\varliminf$表示下极限.其中$Y=0$是最常用的特例.

勒贝格(H.Lebesgue)控制收敛定理 若存在可积随机变量Y,使对于一切$n\geq 1$,几乎必然成立$|X_n|\leq Y$,且$X_n\xrightarrow{\text{in}P}X$,则

$$EX_n\to EX.$$

4.3 大 数 律

4.3.1 概述

大数律是判断随机变量序列的算术平均值是否向常数收敛的定律,是概率论和数理统计学的基本定律之一.

伯努利大数律 若ν_n是n次独立重复试验中事件A出现的次数,p是事件A的概率,则对于任何$\epsilon>0$,有

$$\lim_{n\to\infty}P\left\{\left|\frac{\nu_n}{n}-p\right|\geq\epsilon\right\}=0.$$

即频率ν_n依概率收敛于p.

伯努利大数律揭示了“频率稳定于概率”说法的实质．它提出200年以后，数学家博雷尔才证明了一个更强的强大数律．

博雷尔强大数律 在与伯努利大数律同样的条件下，$\frac{\nu_n}{n}$以概率1收敛于p．

大数律表明，对于有同一概率分布的n次独立观察值$X_1, X_2, \cdots, X_n$，其平均$\overline{X}_n = \frac{1}{n}(X_1 + X_2 + \cdots + X_n)$将随$n$的增大而收敛于该分布的期望$\mu$．由于收敛可以有多种不同的方式，按其收敛为依概率收敛、以概率1收敛或均方收敛的不同情形，分别有**弱大数律**、**强大数律**或**均方大数律**．弱大数律又常通称为**大数律**．

4.3.2 几个著名的大数律

除上述的伯努利大数律及博雷尔强大数律外，还有下面两个著名的大数律．

辛钦(A.J.Khintchin)大数律 若$\{X_n\}$是独立同分布的随机变量序列，$EX_n = \mu$存在且有限，则$\overline{X}_n$依概率收敛于μ．

科尔莫戈罗夫强大数律 在与辛钦大数律同样条件下，$\overline{X}_n$以概率1收敛于μ．

进一步，大数律中涉及到的随机变量序列$\{X_n\}$也可以不是相互独立的．例如，可以是某种弱相依的平稳序列；代替随机变量序列的算术平均，也可以是其部分和的某种线性函数序列向常数的收敛，等等．

4.3.3 重对数律

重对数律研究的是算术平均向数学期望的收敛速度，因这速度中通常出现形如$\log\log A_n$(A_n为与n有关的数值)的项，故得名．它比通常的强大数律要精确和深入得多．

重对数律 设$\{X_n\}$为独立同分布的随机变量序列，

$$EX_n = 0, \quad \operatorname{var}(X_n) = \sigma^2 < \infty .$$

记

$$S_n = X_1 + X_2 + \cdots + X_n ,$$

则

$$P\left\{\overline{\lim_{n\to\infty}} \frac{S_n}{\sqrt{2\sigma^2 n \log\log n}} = 1\right\} = 1,$$

$$P\left\{\underline{\lim_{n\to\infty}} \frac{S_n}{\sqrt{2\sigma^2 n \log\log n}} = -1\right\} = 1.$$

也就是说，当$n\to\infty$时，算术平均$\frac{S_n}{n}$趋于$EX = 0$的速度与$\sqrt{\frac{\log\log n}{n}}$趋于0的速度相当．

4.4 中心极限定理

4.4.1 概述

中心极限定理是判断随机变量序列部分和的分布是否渐近于正态分布的一类定理,它在概率论发展的很长一段时期内是研究的中心课题．在自然界及生产、科学实践中,一些现象受到许多相互独立的随机因素的影响,如果每个因素的影响都很微小,那么总的影响可以看作是服从正态分布的．中心极限定理正是从数学上论证了这一现象．

历史上最早的中心极限定理如下:

棣莫弗(A. De Moivre)定理 若 ν_n 是 n 次独立重复试验(伯努利试验)中事件 A 出现的次数,$p(0<p<1)$是事件 A 的概率,$q=1-p$,则对于任意实数 $a<b$,成立

$$\lim_{n\to\infty}P\left\{a<\frac{\nu_n-np}{\sqrt{npq}}\leqslant b\right\}=\Phi(b)-\Phi(a),$$

其中

$$\Phi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{x}\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)\mathrm{d}u$$

是标准正态分布 $N(0,1)$的分布函数．

随后拉普拉斯对这一结果又作了推广．

在这一定理形成的过程中,同时也解决了 ν_n 等于 k 的概率

$$P\{\nu_n=k\}=\binom{n}{k}p^kq^{n-k}$$

渐近于正态密度的问题:在任意给定的有限区间$[c,d]$中,对于满足 $c\leqslant x_k=\dfrac{(k-np)}{\sqrt{npq}}\leqslant d$ 的 k,一致地成立

$$\lim_{n\to\infty}\frac{p\{\nu_n=k\}}{\varphi(x_k)\sqrt{npq}}=1,$$

其中

$$\varphi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-\frac{x^2}{2})$$

是标准正态分布的密度函数．这一类定理称为**局部极限定理**．

上述结果至今仍对当 n 较大时二项分布概率的近似计算起着重要作用．

4.4.2 几个著名的中心极限定理

设$\{X_n,n\geqslant 1\}$为独立随机变量序列,

$$EX_n=\mu_n,\quad \mathrm{var}(X_n)=\sigma_n^2,$$

$$s_n{}^2 = \sum_{k=1}^{n} \sigma_k^2, \quad S_n = \sum_{k=1}^{n} X_k.$$

又令 S_n 的标准化 S_n^* 为

$$S_n^* = \frac{1}{s_n}\sum_{k=1}^{n}(X_k - \mu_k).$$

林德伯格-莱维(Lindeberg-Levy)定理 若$\{X_n\}$为独立同分布随机变量序列,则只须 $0 < \mathrm{var}(X_n) = \sigma^2 < \infty$,就有

$$\lim_{n\to\infty} P\{S_n^* \leqslant x\} = \lim_{n\to\infty} P\left\{\frac{S_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \leqslant x\right\} = \Phi(x) \qquad (x \in \mathbf{R}).$$

李雅普诺夫(A. M. Lyapunov)定理 若存在 $\delta > 0$,使

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{s_n^{2+\delta}} \sum_{k=1}^{n} E\,|X_k - \mu_k|^{2+\delta} = 0,$$

则有

$$\lim_{n\to\infty} P\{S_n{}^* \leqslant x\} = \Phi(x) \qquad (x \in \mathbf{R}).$$

林德伯格-费勒定理 设 $F_k(X)$表 X_k 的分布函数.若对于任意 $\tau > 0$,成立林德伯格(Y. W. Lindeberg)条件

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{s_n{}^2} \sum_{k=1}^{n} \int_{|x-\mu_k| \geqslant \tau s_n} (x - \mu_k)^2 \mathrm{d}F_k(x) = 0,$$

则同时成立

$$\lim_{n\to\infty} P\{S_n{}^* \leqslant x\} = \Phi(x) \qquad (x \in \mathbf{R}),$$

和费勒(W. Feller)条件

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{s_n^2} \max_{1\leqslant k\leqslant n} \sigma_k^2 = 0.$$

反之亦然.

实际上林德伯格-费勒定理已在方差有限的条件下彻底解决了独立随机变量序列的中心极限问题,前两个定理都是它的推论.此后的研究,一是减弱对随机变量独立性的要求,二是估计向正态分布收敛的速度.关于后者,有下面的不等式.

贝里-埃森(Berry-Essen)不等式 对于独立随机变量序列$\{X_n\}$,记其标准化部分和 S_n^* 的分布函数为$\Phi_n(x)$,则有

$$\sup_x |\Phi_n(x) - \Phi(x)| \leqslant A s_n^{-3/2} \sum_{k=1}^{n} E\,|X_k - \mu_k|^3,$$

其中 A 为一常数.

4.5 大偏差定理

对于独立同分布的随机变量序列$\{X_n\}$,若 $EX_k = \mu$, $\mathrm{var}(X_k) = \sigma^2 < \infty$,则可以证明其标准化部分和

$$S_n^* = \frac{S_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}}.$$

对于任意固定的 $M>0$,当 $0\leqslant x\leqslant M$ 时,一致地成立

$$\lim_{n\to\infty}\frac{P\{S_n^* > x\}}{1-\Phi(x)} = 1,$$

$$\lim_{n\to\infty}\frac{P\{S_n^* \leqslant -x\}}{\Phi_n(-x)} = 1.$$

但是,如果 x 的上界 M 随着 n 的增大而单调趋于无穷,则上述极限关系可能不成立 . 大偏差定理就是研究其成立条件的一类定理 . 结果表明,这取决于 X_n 的分布及 M_n 随 n 趋于无穷的速度 . 这类定理对于精确估计随机变量序列收敛的速度是很重要的 . 确切地说,若 $0<M_n\to\infty$,而且成立

$$\lim_{n\to\infty}\sup_{0\leqslant x\leqslant M_n}\left|\frac{P\{S_n^* > x\}}{1-\Phi(x)} - 1\right| = 0,$$

$$\lim_{n\to\infty}\sup_{0\leqslant x\leqslant M_n}\left|\frac{P\{S_n^* \leqslant -x\}}{\Phi(-x)} - 1\right| = 0,$$

则称对于 M_n 的大偏差定理成立 . 它的证明与偏差概率的指数界不等式密切相关.

例如,克拉默(H.Cramer)证明:若存在 $H>0$,使 $Ee^{H|X_1|}<\infty$,则对于满足 $\lim\limits_{n\to\infty}\frac{M_n}{\sqrt{n}}=0$ 的 M_n,大偏差定理成立 .

大偏差理论经20世纪70年代以来众多学者的开拓与发展,已成为概率论的一个有广泛应用与深刻内涵的新分支 .

5 常用概率分布

表1-1列举了概率论与数理统计学中常用的概率分布、它们的名称与标准记号、分布列或密度函数的表达式、相应的期望与方差(如果存在),以及相应的特征函数 . 另外,还加了若干有用的附注 . 表1-1摘自《中国大百科全书·数学卷》"概率分布"条 .

表 1-1 常用概率分布表

分布名称	单点分布(退化分布)	两点分布(伯努利分布)	对数分布
分布列或密度函数	$P_c=1$, c 为常数	$p_k=\begin{cases}q(k=0,0<p<1),\\p(k=1,q=1-p).\end{cases}$	$p_k=c\dfrac{q^k}{k},0<q<1,c=-\dfrac{1}{\ln(1-q)}$ $k=1,2,\cdots$
密度函数图形	略	略	略
数学期望	c	p	$\dfrac{cq}{1-q}$
方差	0	pq	$\dfrac{cq(1-cq)}{(1-q)^2}$
特征函数	e^{itc}	$q+pe^{it}$	$\dfrac{\ln(1-qe^{it})}{\ln(1-q)}=-c\ln(1-e^{it})$
附注			

续表

分布名称	二项分布 $B(n,p)$	几何分布	负二项分布(帕斯卡(Pascal)分布)
分布列或密度函数	$b(k,n,p)=\binom{n}{k}p^kq^{n-k}$, $0<p<1, q=1-p, k=0,1,\cdots,n$	$p_k=pq^k, k=0,1,\cdots$ $0<p<1, q=1-p$	$p_k=\binom{-r}{k}p^r(-q)^k=\binom{r+k-1}{k}p^rq^k$, r 为正整数,$0<p<1, q=1-p, k=0,1,\cdots$
密度函数图形	略	略	略
数学期望	np	qp^{-1}	$\frac{rq}{p}$
方差	npq	qp^{-2}	$\frac{rq}{p^2}$
特征函数	$(q+pe^{it})^n$	$p(1-qe^{it})^{-1}$	$\left(\frac{p}{1-qe^{it}}\right)^r$
附注	1. 若 $X_i, i=1,\cdots,n$,独立且有相同的两点分布,则 $\sum_{i=1}^{n}X_i$ 服从二项分布 2. 若 X_1,X_2 分别服从 $B(n_1,p)$, $B(n_2,p)$且独立,则 X_1+X_2 服从 $B(n_1+n_2,p)$	在负二项分布中,$r=1$ 即为此分布.有的书中称 $p_k=pq^{k-1}, k=1,2,\cdots$为几何分布	1. 若 $X_i, i=1,\cdots,r$,独立且服从相同的几何分布,则 $\sum_{i=1}^{r}X_i$ 服从负二项分布 2. 有的书中称 $\tilde{p}_n\overset{\text{def}}{=\!=}p_k, n=r+k$, $k=0,1,\cdots$为帕斯卡分布

续表

分布名称	超几何分布	泊松分布 $P(\lambda)$	逆高斯分布
分布列或密度函数	$p_k=\binom{M}{k}\binom{N-M}{n-k}\Big/\binom{N}{n}$， N,M,n 为正整数，$M\leqslant N,n\leqslant N$， $\max(0,n+M-N)\leqslant k\leqslant\min(n,M)$	$p(k;\lambda)=\frac{\lambda^k}{k!}e^{-\lambda}$， $\lambda>0,k=0,1,\cdots$	$p(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{\lambda}{2\pi x^5}}\cdot\exp\left(-\frac{\lambda(x-a)^2}{2a^2x}\right) & (x>0),\\ 0 & (x\leqslant 0),\end{cases}$ $\lambda>0,a>0$
密度函数图形	略	略	略
数学期望	$\frac{nM}{N}$	λ	a
方差	$\frac{nM}{N}\left(1-\frac{M}{N}\right)\frac{N-n}{N-1}$	λ	$\frac{a^3}{\lambda}$
特征函数	$\frac{\binom{N-M}{n}}{\binom{N}{n}}F(-n,-M;N-M-n+1;e^{it})$	$\exp(\lambda(e^{it}-1))$	$\exp\left(\frac{\lambda}{a}\left(1-\left(\frac{1+a^2it}{\lambda}\right)^{1/2}\right)\right)$
附注	$F(\alpha,\beta;\gamma;x)$为超几何函数	若 X_i，$i=1,2$，服从 $P(\lambda_i)$且独立，则 X_1+X_2 服从 $P(\lambda_1+\lambda_2)$	

续表

分布名称	均匀分布 $U[a,b]$	正态分布(高斯分布)$N(\mu,\sigma^2)$	柯西分布 $C(\lambda,\mu)$
分布列或密度函数	$p(x)=\begin{cases}1/(b-a) & (a\leqslant x\leqslant b),\\ 0 & (其他),\end{cases}$ $a<b$ 为常数	$p(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$, $-\infty<x<\infty,\sigma>0,\mu$ 为实数	$p(x)=\frac{1}{\pi}\frac{\lambda}{\lambda^2+(x-\mu)^2}$, x 为实数,$\lambda>0,\mu$ 为常数
密度函数图形	$\frac{1}{b-a}$; a; b	$\frac{1}{\sigma\sqrt{2}\pi}$	$1/\pi\lambda$; μ
数学期望	$\frac{a+b}{2}$	μ	不存在
方差	$\frac{(b-a)^2}{12}$	σ^2	不存在
特征函数	$\frac{e^{itb}-e^{ita}}{(b-a)it}$	$\exp\left(it\mu-\frac{1}{2}t^2\sigma^2\right)$	$\exp(i\mu t-\lambda\mid t\mid)$
附注	若 X 的分布函数 $F(x)$ 连续,则 $Y=F(X)$ 服从 $U[0,1]$,即在$[0,1]$中均匀分布		若 X_i, $i=1,2$,服从 $C(\lambda_i,\mu_i)$ 且独立,则 X_1+X_2 服从 $C(\lambda_1+\lambda_2,\mu_1+\mu_2)$

续表

分布名称	对数正态分布	伽玛(Γ)分布 $\Gamma(\lambda, r)$	贝塔(β)分布
分布列或密度函数	$p(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sigma x\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\dfrac{(\ln x-a)^2}{2\sigma^2}\right) & (x>0),\\ 0 & (x\leqslant 0),\end{cases}$ $\sigma>0$, a 为实数	$p(x)=\begin{cases}\dfrac{\lambda^r}{\Gamma(r)}x^{r-1}e^{-\lambda x} & (x>0),\\ 0 & (x\leqslant 0),\end{cases}$ $r>0, \lambda>0$ 为常数	$p(x)=\begin{cases}\dfrac{\Gamma(p+q)}{\Gamma(p)\Gamma(q)}x^{p-1}(1-x)^{q-1} & (0<x<1),\\ 0 & (其他),\end{cases}$ $p>0, q>0$ 为常数
密度函数图形	0.1；0；$\sigma=0.1$；$\sigma=0.3$；$\sigma=0.5$	3/4；1/2；1/4；0；1；2；3；4；$r=1$；$r=2$；$r=4$	$p=q=2$ 时；1.5；0；1
数学期望	$\exp\left(a+\dfrac{\sigma^2}{2}\right)$	$\dfrac{r}{\lambda}$	$\dfrac{p}{p+q}$
方　差	$\exp(2a+\sigma^2)(\exp\sigma^2-1)$	$\dfrac{r}{\lambda^2}$	$\dfrac{pq}{(p+q)^2(p+q+1)}$
特征函数		$\left(1-\dfrac{it}{\lambda}\right)^{-r}$	$\dfrac{\Gamma(p+q)}{\Gamma(p)}\sum\limits_{j=0}^{\infty}\dfrac{\Gamma(p+j)(it)^j}{\Gamma(p+q+j)\Gamma(j+1)}$
附　注	设 X 服从正态分布 $N(a,\sigma^2)$，则 $Y=e^X$ 服从对数正态分布	1. $r=1$ 时化为指数分布 2. r 为整数时，设 $X_i, i=1,2,\cdots,r$，独立且服从相同的指数分布，则 $\sum\limits_{i=1}^{r}X_i$ 服从 Γ 分布 3. 当 $r=n/2$ 时，$\lambda=1/2$ 时，化为 $\chi^2(n)$ 分布	1. 若 $X_i, i=1,2$，服从 $\Gamma(1,r_i)$ 且独立，则 $Y=X_1/(X_1+X_2)$ 服从以 $p=r_1$，$q=r_2$ 为参数的 β 分布． 2. 当 $p=q=1/2$ 时，化为反正弦分布，其密度为 $1/\pi\sqrt{x(1-x)}$，$(0<x<1)$；分布函数为 $2\arcsin\sqrt{x}/\pi$

续表

分布名称	指数分布	韦布尔分布 $W(\lambda,a)$	拉普拉斯分布
分布列或密度函数	$p(x)=\begin{cases}\lambda e^{-\lambda x} & (x>0),\\ 0 & (x\leqslant 0),\end{cases}$ $\lambda>0$ 为常数	$p(x)=\begin{cases}a\lambda x^{a-1}\exp(-\lambda x^a) & (x>0),\\ 0 & (x\leqslant 0),\end{cases}$ $\lambda>0, a>0$ 为常数	$p(x)=\frac{1}{2\lambda}\exp\left(-\frac{\|x-\mu\|}{\lambda}\right)$，$x$ 为实数 $\lambda>0$，μ 为常数
密度函数图形	$\lambda=0.5$	$a=3$　$\lambda=1$　1　$a=2$	$\frac{1}{2\lambda}$
数学期望	λ^{-1}	$\lambda^{-\frac{1}{2}}\Gamma\left(1+\frac{1}{a}\right)$	μ
方　差	λ^{-2}	$\lambda^{-\frac{2}{a}}\left(\Gamma\left(1+\frac{2}{a}\right)-\left(\Gamma\left(1+\frac{1}{a}\right)\right)^2\right)$	$2\lambda^2$
特征函数	$\left(1-\frac{it}{\lambda}\right)^{-1}$		$\frac{e^{i\mu t}}{1+\lambda^2t^2}$
附　注	指数分布是 Γ 分布的特殊情形	$a=1$ 时为指数分布，$a=2$ 时称为瑞利(Rayleigh)分布．当 X 服从指数分布时，$Y=X^{1/a}$ 服从韦布尔(Weibull)分布	

续表

分布名称	χ^2 分布	学生分布　$t(n)$	F 分布　$F(n_1,n_2)$
分布列或密度函数	$p(x)=\begin{cases}\dfrac{x^{(n-2)/2}e^{-x/2}}{2^{n/2}\Gamma\left(\dfrac{n}{2}\right)} & (x>0),\\ 0 & (x\leqslant 0),\end{cases}$ n 为正整数	$p(x)=\dfrac{1}{\sqrt{n\pi}}\dfrac{\Gamma\left(\dfrac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\dfrac{n}{2}\right)}\left(1+\dfrac{x^2}{n}\right)^{-\frac{n+1}{2}}$,	$p(x)=\begin{cases}\dfrac{x^{\frac{n_1}{2}-1}}{\beta(n_1,n_2)}n_1^{\frac{n_1}{2}}n_2^{\frac{n_2}{2}}\times(n_2+n_1x)^{-\frac{n_1+n_2}{2}} & (x>0),\\ 0 & (x\leqslant 0),\end{cases}$ n_1,n_2 为正整数
密度函数图形	0.5, 0.2, 0.1, 0, 2, 4, 6; $n=2$, $n=1$, $n=6$	0.4, −4, −2, 0, 2, 4; $n=3$ 时	0.9, 0.6, 0, 1, 2; $n_1=10$ $n_2=50$; $n_1=10$ $n_2=4$
数学期望	n	$0(n>1)$	$\dfrac{n_2}{n_2-2}$　$(n_2>2)$
方　　差	$2n$	$\dfrac{n}{n-2}$ $(n>2)$	$\dfrac{2n_2^2(n_1+n_2-2)}{n_1(n_2-2)^2(n_2-4)}$　$(n_2>4)$
特征函数	$(1-2it)^{-n/2}$	$\dfrac{\Gamma\left(\dfrac{n+1}{2}\right)}{\sqrt{n}\Gamma\left(\dfrac{n}{2}\right)}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\dfrac{\exp(itx\sqrt{n})}{(1+x^2)^{(n+1)/2}}dx$	
附　　注	1. 若 $X_i, i=1,2$,服从 $\chi^2(n_i)$分布且独立,则 X_1+X_2 服从 $\chi^2(n_1+n_2)$分布 2. 若 $X_1,\cdots,X_n$ 独立且都服从 $N(0,1)$,则 $\sum\limits_{i=1}^{n}X_i^2$ 服从 $\chi^2(n)$ 分布	1. 设 $X_1,\cdots,X_n$ 独立,且都服从 $N(0,\sigma^2)$,则 $X\Big/\sqrt{\dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}X_i^2}$ 服从 $t(n)$ 分布 2. $n=1$ 时,化为柯西分布 $C(1,0)$	若 $X_i, i=1,2$,独立且服从 $\chi^2(n_i)$分布,则$\dfrac{X_1/n_1}{X_2/n_2}$服从 $F(n_1,n_2)$分布

续表

分布名称	帕雷托分布	极值分布 $E(\alpha,\beta)$	逻辑斯蒂分布
分布列或密度函数	$p(x)=\begin{cases} ra^r\frac{1}{x^{r+1}} & (x\geqslant a), \\ 0 & (x<a), \end{cases}$ $r>0,a>0$ 为常数	$p(x)=\frac{1}{\beta}\exp\left(\exp\left(-\frac{x-\alpha}{\beta}\right)-\frac{x-\alpha}{\beta}\right)$, x,α 均为实数, $\beta>0$ 为常数	$p(x)=\frac{\exp\left(-\frac{x-\alpha}{\beta}\right)}{\beta\left(1+\exp\left(-\frac{x-\alpha}{\beta}\right)\right)^2}$, x,α 为实数, $\beta>0$ 为常数
密度函数图形	略	略	略
数学期望	$\frac{ra}{r-1}$ $(r>1)$	$\alpha+\gamma\beta$ （γ 是欧拉常数）	α
方差	$\frac{ra^2}{(r-1)^2(r-2)}$ $(r>2)$	$\frac{\pi^2\beta^2}{6}$	$\frac{\pi^2\beta^2}{3}$
特征函数		$e^{i\alpha t}\Gamma(1-i\beta t)$	$\frac{\pi\beta i t}{\sin(\pi\beta i t)}e^{i\alpha t}$
附注	若 X 服从帕雷托(Pareto)分布,参数为 r,a,则 $Y=\frac{r}{\lambda}\ln\frac{X}{a}$ 服从指数分布	若 X 服从威布尔分布 $W(\lambda,\alpha)$,则 $Y=-\beta\ln X^{\alpha}\lambda+\mu$ 服从极值分布 $E(\mu,\beta)$	

续表

分布名称	非中心 χ^2 分布 $\chi^2(n,\lambda)$	非中心 t 分布 $t(n,\delta)$	非中心 F 分布 $F(m,n;\lambda)$
分布列或密度函数	$p(x)=\begin{cases}\dfrac{\exp-\left(\dfrac{x+\lambda}{2}\right)}{2^{n/2}}\times\sum\limits_{j=0}^{\infty}\dfrac{x^{\frac{n}{2}+j-1}\lambda^j}{\Gamma\left(\dfrac{n}{2}+j\right)2^{2j}j!} & (x>0),\\ 0 & (x\leqslant 0),\end{cases}$ n 为自由度;$\lambda>0$ 为非中心参数	$p(x)=\dfrac{n^{n/2}\exp(-\delta^2/2)}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\dfrac{n}{2}\right)(n+x^2)^{(n+1)/2}}\times\sum\limits_{m=0}^{\infty}\Gamma\left(\dfrac{n+m-1}{2}\right)\left(\dfrac{\delta^m}{m!}\right)\times\left(\dfrac{2\chi^2}{2+\chi^2}\right)^{n/2}$, n 为自由度,δ 为实数,是非中心参数	$p(x)=\dfrac{m^{m/2}n^{n/2}}{\Gamma\left(\dfrac{n}{2}\right)}e^{-\frac{\lambda}{2}}x^{\frac{m}{2}-1}\times\sum\limits_{k=0}^{\infty}\dfrac{(\lambda mx/2)^k\Gamma\left(\dfrac{m+n}{2}+k\right)}{\Gamma\left(\dfrac{m}{2}+k\right)k!(mx+n)^{\frac{m+n}{2}+k}}$ $(x>0)$, $p(x)=0$ $(x\leqslant 0)$, m,n 为二自由度,λ 为非中心参数
密度函数图形	略	略	略
数学期望	$n+\lambda$	$\dfrac{\delta\Gamma\left(\dfrac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\dfrac{n}{2}\right)}\sqrt{\dfrac{n}{2}}$ $(n>1)$	$\dfrac{n(m+\lambda)}{m(n-2)}$ $(n>2)$
方差	$2(n+2\lambda)$	$\dfrac{n(1+\delta^2)}{n-2}-\dfrac{\delta^2 n}{2}\left(\dfrac{\Gamma\left(\dfrac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\dfrac{n}{2}\right)}\right)^2$ $(n>2)$	$\dfrac{2n^2}{m^2(n-2)^2(n-4)}\cdot[(m+\lambda)^2+(n-2)\cdot(m+2\lambda)]$ $(n>4)$
特征函数	$(1-2it)^{-\frac{n}{2}}\exp\left(\dfrac{i\lambda t}{1-2it}\right)$		
附注	1. 若 $X_i, i=1,\cdots,n$,独立且服从 $\chi^2(n_i,\lambda_i)$,则 $\sum\limits_{i=1}^{n}X_i$ 服从 $\chi^2\left(\sum\limits_{i=1}^{n}n_i,\sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i\right)$ 2. 若 $X_i, i=1,\cdots,n$,独立且服从 $N(\delta_i,1)$,则 $\sum\limits_{i=1}^{n}X_i^2$ 服从 $\chi^2(n,\lambda)$,$\lambda=\sum\limits_{i=1}^{n}\delta_i^2$	若 X 服从 $N(\delta,1)$,Y 服从 $\chi^2(n)$,X,Y 独立,则 $X/\sqrt{\dfrac{Y}{n}}$ 服从 $t(n,\delta)$	若 X 服从 $\chi^2(m,\lambda)$,Y 服从 $\chi^2(n)$,则 $\dfrac{X/m}{Y/n}$ 服从 $F(m,n;\lambda)$

注:$\left(\dfrac{r}{k}\right)=\dfrac{r(r-1)\cdots(r-k+1)}{k!}$,$r$ 为实数,k 为正整数.$\Gamma(x)=\int_0^{\infty}e^{-u}u^{x-1}du$,$x>0$ 为伽玛(Γ)函数.$B(m,n)=\dfrac{\Gamma(m)\Gamma(n)}{\Gamma(m+n)}$ 为贝塔(B)函数.

参 考 文 献

1 复旦大学编．概率论(第一册 概率论基础)．北京：高等教育出版社，1979．
2 严士健，王隽骧，刘秀芳．概率论基础．北京：科学出版社，1982．
3 Chow Y S, Teicher H. Probability theory. New York: Springer Verlag, 1978.

·随机数学卷·

第2篇

数理统计

编　者　陈希孺
审校者　成　平

目　录

引 言

数理统计学的研究对象，是收集数据和分析数据的方法和数学原理. 数理统计学与概率论有密切关系. 在西方如美、英等国，数理统计学称为统计学. 在我国，因还有一门被认为是属于社会科学的(社会经济)统计学，故"数理"这个界定词不能少. 因本篇只涉及数理统计学，为行文简便，下面都将"数理"二字略去.

统计学早期的发展是结合其他学科进行的，并无"专职"的统计学家，也没有一个严整的数学框架. 例如，在天文学和测地学应用的基础上发展了最小二乘法和高斯(G.F.Gauss)的正态误差理论，在遗传学的应用中发展了相关回归方法等. 进入20世纪后，经过哥色特(W.S.Gosset，笔名Student)，费希尔(R.A.Fisher)，奈曼(J.Neyman)，皮尔逊(E.S.Pearson)和沃尔德(A.Wald)等一批学者的努力，不仅统计应用方法有了很大的充实，而且统计学也建成了一个严整且在数学上严格的体系.

第二次世界大战以后，统计学在数学深度上有了迅猛的发展，应用面急剧扩大，几乎涵盖了自然和社会的所有领域，特别是计算机的问世和其性能的不断改善，为许多人力难及的计算量的统计方法的使用开辟了道路. 这些促成了这门学科在理论和应用方面的蓬勃发展，并日益受到社会的重视.

统计学有很多分支学科. 有的依统计推断的特殊形态而设立；有的依据其处理的数据的特殊形态而设立(例如多元分析、方差分析、时间序列分析等)；有的则依其应用对象而设立，这又往往形成一种边缘或交叉性学科，如可靠性统计分析、生存分析、生物统计、抽样检验等. 对某些重要的分支本书辟有专篇介绍. 本篇内容属于统计学的公共基础部分，即一些最基本的统计推断形式(点估计、假设检验、区间估计)的原理和方法.

从历史上看，数理统计方法多是由于解决实际问题的需要而建立的，故这门学科有很强的应用性. 它的理论基础可视为数学的一部分，但由于其应用性的特征，在数理统计学比较发达的国家里，这门学科早已取得与数学平行的地位.

1 基本概念

1.1 总 体

1.1.1 总体的定义

定义1 **总体**是指与所研究的问题有关的全部个体的集合.

如研究某市大学生的身高状况，则总体包括该市全体大学生；研究一批产品的合格率，则总体包括该批中的全部产品. 总体的界定依赖于对问题的要求，而这与

所能提供的条件(人力、物力、时间等)有关.

上述这些总体都由一些现实的个体组成.若个体数是有限的,则这种总体称为有限总体.有时总体只是一种想像中的存在.如对一个物理量进行测量,以估计其值,总体由一切可以想像的观测值所组成.这种总体从理论上说包含无穷多个体,称为无限总体.当有限总体所含个体数足够大时,也可近似地按无限总体去处理.

由于人们关心的只是个体的某项数字指标,如大学生的身高,产品合格与否(合格为0,不合格为1),故总体也可以定义为实数的某一个集合,例如全体实数集$\mathbf{R}$,或一指定区间$[a,b]$,或全部非负整数集.有时人们对个体的几个指标感兴趣(如身高和体重),这时总体是$\mathbf{R}^k$或它的某一子集,这样的总体称为多维(k维)总体.

有时在同一问题中可以有若干个总体.如比较3个不同城市的大学生的身高状况,需把每个城市的大学生分别看作是一个总体,故问题中有3个总体.

1.1.2 总体分布

定义2 总体内各部分数值出现的可能性大小不一,即有各自的概率,因而形成了一个概率分布,称之为**总体分布**.

因为统计学关心的是整体性态,而不关心总体中特定个体的行为,也就是说,只关心总体的概率分布.一旦这一概率分布已知,就再没有什么需要统计学去效力的了.因此,统计学中所研究的总体,其概率分布必属未知.这又有两种情况.

(1) 总体分布的数学形式已知,但有若干参数未知.这种总体又称为参数总体.如总体分布为正态分布$N(\mu,\sigma^2)$,但μ和σ^2未知.这个总体依其分布的名称称为正态总体.因其参数$\theta=(\mu,\sigma^2)$为二维参数,故又称该总体为双(二)参数总体.θ的范围为$-\infty<\mu<\infty,\sigma^2>0$,构成一个半平面,称之为**参数空间**,常记为$\Theta$.因此,一般地把一个参数总体的分布写为$\{F_\theta:\theta\in\Theta\}$的形式,这是一个分布族.

(2) 总体分布完全未知,但有某种一般性的限制.例如,假定总体分布连续,则一切连续分布构成总体分布族.这种总体称为非参数总体.常记为$\{F:F\in\mathscr{F}\}$的形式,$\mathscr{F}$是一个分布族.也不妨把它记为$\{F_\theta:\theta\in\Theta\}$,$\theta$就是$F$本身,而$\Theta$就是$\mathscr{F}$.

总体分布的重要意义在于,它把一些性质各异(人、产品、测量值等)的对象统一在一个数学模式下.如果两个总体其分布都是正态分布,则正态总体的统计方法适用于二者,而不必顾及各自个体的差异.统计方法能够作为数学的一个分支去研究,其根源就在此.

1.2 样　本

1.2.1 样本的定义

定义3 以一定方式从总体中抽取的若干个体,称为样本.也把其中的单个个体叫**样本**.样本中所含个体的数目叫**样本量**.

由于总体已数量化了(见1.1.1小节),故样本也是数值.具体的样本有具体数

值,称为样本值.抽象地说,由于抽样有随机性,样本是随机变量,其分布称为**样本分布**,它取决于总体分布、样本量及抽样方式(如有限总体中抽样有放回样本,不放回样本之分).样本所能取的值的全体,称为**样本空间**.例如,总体为 $\mathbf{R}$ 而样本量为 n 时,样本空间为 $\mathbf{R}^n$.

1.2.2 独立同分布样本

把样本量为 n 的样本记为$(X_1,X_2,\cdots,X_n)$.为了简便,有时也用一个符号,如 $\boldsymbol{X}$,去记它.如前所述,$\boldsymbol{X}$ 的分布即样本分布.

定义4 设 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 相互独立且每一个的分布与总体分布相同,则称 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为**独立同分布样本**.简称 i.i.d.样本,其分布就是 $F_\theta(x_1)F_\theta(x_2)\cdots F_\theta(x_n)$,$F_\theta$ 为总体分布.这个情况相当于每个样本系从总体中独立抽得,且每次抽样不改变总体的构成,因而不影响其分布.这一点对于无限总体成立,而对于有限总体,则要求每次抽样后放回.当有限总体中包含的个体数相对于样本量 n 足够大时,即使在不放回的情况下,也可近似地当作 i.i.d.样本处理.

非 i.i.d.样本在应用中也不少见,最显著的例子是时间序列、可靠性分析中的定时或定数截尾数据,它们是相互依赖的.一个独立但非 i.i.d.样本的重要例子是无放回抽样(在总体所含个体数不太大时).另一个例子是多样本问题:一个问题中有好几个总体(见1.1.1小节),从每个总体中抽出 i.i.d.样本并总假定从各总体中抽得的样本独立,则合样本是独立但非同分布的样本,因各总体的分布可以不同.

1.3 统 计 量

1.3.1 统计量的定义

定义5 设 $\boldsymbol{X}=(X_1,X_2,\cdots,X_n)$是从某总体中抽得的样本,$T=T(\boldsymbol{X})$是 $\boldsymbol{X}$ 的函数,且除依赖于样本 $\boldsymbol{X}$ 外,不依赖于任何其他的未知量,则 T 称为一个**统计量**.

例如,设样本为 $X_1,X_2,\cdots,X_n$,则其算术平均可记为

$$\overline{X}=\sum_{i=1}^{n}\frac{X_i}{n},$$

有时为明显标出样本量 n,也记为 X_n,是一个统计量,称为**样本均值**.但若 θ 为总体分布的期望,而 θ 未知,则 $\overline{X}-\theta$ 不是统计量,因其中包含了未知量 θ,不是由样本完全决定.

1.3.2 经验分布函数

定义6 设样本为 $X_1,X_2,\cdots,X_n$,则以概率$\frac{1}{n}$ 取 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 的每一个值的分布 F_n,称为(这组样本的)**经验分布**.

易见

$$F_n(x) = \frac{\{X_1, X_2, \cdots, X_n \text{中不超过} x \text{的个数}\}}{n} \quad (-\infty < x < \infty).$$

经验分布 F_n 是总体分布(又称理论分布)的模拟物.其理论根据在于下面的著名定理.

定理 1 (格利文科定理) 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为由其分布为 F 的总体中抽出的 i.i.d. 样本,则当 $n \to \infty$ 时,以概率 1,成立

$$\sup\{|F_n(x) - F(x)| : -\infty < x < \infty\} \to 0,$$

称为格利文科(V.I.Glivenko)定理。

这个定理表明:只要样本量 n 足够大,就可以通过经验分布 F_n 把未知的总体分布逼近到任何要求的精度.有的学者把这个定理夸张(但并非无理)地解释为"统计学的存在定理",因为它在理论上明确了通过样本去推断总体的可能性.

1.3.3 基于经验分布构作的统计量

抽样的目的是对总体分布 F,或 F 的某项特征 $T(F)$(例如其均值、方差等)获得一些信息.由格利文科定理,容易得到如下的思路:既然经验分布 F_n 是总体分布 F 的很好的模拟物,那么很可能 $T(F_n)$ 也是 $T(F)$ 很好的模拟物.基于此,人们构造了许多有用的统计量.下面举例介绍.

(1) 总体期望 → 样本均值 $\overline{X}$ $\overline{X}$ 就是分布 F_n 的数学期望.

(2) 总体中位数 → **样本中位数** m 将样本 $X_1, X_1, \cdots, X_n$ 按由小到大的次序排列为

$$X_{(1)} \leqslant X_{(2)} \leqslant \cdots \leqslant X_{(n)}, \tag{1-1}$$

$X_{(1)}, X_{(2)}, \cdots, X_{(n)}$ 称为**次序统计量**.样本中位数 m 是指 $X_{(1)}, X_{(2)}, \cdots, X_{(n)}$ 中居中的一个量(n 为奇数时),或居中的两个量的平均(n 为偶数时),即

$$m = \begin{cases} X_{((n+1)/2)} & (n \text{ 为奇数}), \\ \dfrac{X_{(n/2)} + X_{(n/2+1)}}{2} & (n \text{ 为偶数}). \end{cases}$$

(3) 总体方差 → 样本**方差** S^2

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2}{(n-1)}.$$

按方差的定义,F_n 的方差应为 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2$,与 S^2 相差一个常数因子,这个差别的理由将在 2.2.1 小节中解释,S 称为**样本标准差**.

(4) 总体 k 阶原点矩 α_k → 样本 k 阶原点矩 a_k

$$a_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i^k}{n},$$

其中 k 为自然数;a_1 即为 $\overline{X}$.

(5) 总体 k 阶中心矩 $\mu_k \to$ 样本 k 阶中心矩 m_k

$$m_k = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - X)^k,$$

其中 k 为自然数；$m_1 = 0$；$m_2 = n^{-1}(n-1)S^2$. 大于四阶的样本中心矩很少用. 样本矩的一个重要应用是参数估计中的矩法，见 2.1.2 小节. 二、四阶矩用于下面的统计量：

样本偏度系数　　　　$\beta_1 = \dfrac{m_3}{m_2^{\,3/2}}$,

样本峰度系数　　　　$\beta_2 = \dfrac{m_4}{m_2^{\,2}}$.

前者用于考察分布的对称性：若总体分布关于某点对称，则其(总体)偏度系数 $\mu_3/\mu_2^{3/2}$ 为 0，故样本偏度系数也应接近 0. 后者则用于考察总体分布的正态性：当总体分布为正态时，其(总体)峰度系数为 3，故样本峰度系数也应接近 3. 另一个通过矩定义的有用统计量是

样本变异系数　　　　$\zeta = S/\bar{X}$.

它相应于总体变异系数 $\sqrt{\mu_2}/\alpha_1$. 这个指标一般只用于变量只取非负值时，它表示把衡量总体变异的指标按变量的尺度去调整.

这种通过 $T(F_n)$ 去模拟 $T(F)$ 以构造统计量的例子，还可以举出很多，但是，这不是唯一的方法，也不一定是在每种情况下都最好的方法. 需要什么样的统计量，原则上应由问题的要求来定. 同时，也存在一些情况，其统计量并无总体中的对应物. 例如，

极值　$X_{(1)}, X_{(n)}$;

极差　$X_{(n)} - X_{(1)}$;

截尾平均　$\bar{X}(d) = \dfrac{\sum_{i=d+1}^{n-d} X_{(i)}}{(n-2d)}$.

简单地说，截尾平均即是把样本中大小两端各去掉 d 个样本后，剩下的 $n-2d$ 个样本的平均值. 在 n 个裁判员给同一个运动员打分时，最后结果的计算常取 $\bar{X}(d)$，以防止人为抬高和压低分数. 这些统计量也反映了总体的一定特征. 例如，极差反映了总体的分散程度.

在有些情况下，总体中某一特征，也可以在样本中有若干不同的对应物. 例如，总体分布关于某点 θ 对称，则样本均值 X、样本中位数 m 和截尾平均 $\bar{X}(d)$ 都可与对称中心 θ 相应. 这时，选用哪个统计量应根据有关的条件和知识来决定.

1.3.4　抽样分布

定义 7　设样本为 $(X_1, X_2, \cdots, X_n)$，统计量 $T = T(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 是样本 $(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 的函数，因 $(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 有一定的概率分布，故 T 也有一定的概率分布，这种分布称为 T 的**抽样分布**. 它完全由样本的概率分布决定.

由上定义知,抽样分布就是通常的概率分布,冠以"抽样"这个限定词,并不意味着它有何与众不同的特殊性.之所以这样称呼是因为下述原因:

假定有许多 n 样本组$(X_1^{(i)},X_2^{(i)},\cdots,X_n^{(i)})$,$i=1,2,\cdots$,可以设想它们是从总体中反复抽样所得,则可依据它们算出统计量 T 的一系列值

$$T_i = T(X_1^{(i)},X_2^{(i)},\cdots,X_n^{(i)}) \qquad (i=1,2,\cdots).$$

它们是 T 的i.i.d.样本.于是根据格利文科定理,T 的分布可通过 $T_1,T_2,\cdots,T_n$ 的经验分布近似取得.这提供了一个通过从总体中反复抽样来决定 T 的分布的方法,抽样分布的名称盖源于此.

因为统计推断是通过统计量去进行的,而这种推断的表现取决于所用统计量的分布,因此,对衡量一具体推断方法的优良性指标和可用的推断方法的选择,都无不基于有关统计量的抽样分布.抽样分布的重要性由此就可想而知了.可惜的是,除了有限的几种场合,要确切决定一些常见统计量的抽样分布,很不容易.下面介绍几种统计量的抽样分布.以下假定 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 是i.i.d.样本.

1.样本均值 $\bar{X}$ 的分布

在若干重要的总体分布之下,$\bar{X}$ 的抽样分布可以确定出.例如:

(1) 在正态分布总体 $N(\mu,\sigma^2)$ 下,$\bar{X}$ 有正态分布 $N(\mu,\sigma^2/n)$.

(2) 若总体是二项分布 $B(m,\theta)$,则 $\sum_{i=1}^{n}X_i$ 有分布 $B(mn,\theta)$,由此易写出 $\bar{X}$ 的分布.

(3) 若总体有泊松分布 $P(\theta)$,则 $\sum_{i=1}^{n}X_i$ 有分布 $P(n\theta)$.由此易写出 $\bar{X}$ 的分布.

(4) 若总体有指数分布 $\theta e^{-\theta x}dx(x>0)$,则 $2\theta\sum_{i=1}^{n}X_i$ 服从自由度为 $2n$ 的 χ^2 分布,记为 χ_{2n}^2.χ_n^2 密度为

$$k_n(x) = (2^{n/2}\Gamma(\frac{n}{2}))^{-1}\exp(-\frac{x}{2})x^{n/2-1} \qquad (x>0).$$

当 $x\leqslant 0$ 时为0.由此不难写出 $\bar{X}$ 的密度.

(5) 总体有柯西(A.L.Cauchy)分布,密度为

$$f(x,\theta) = (\pi(1+(x-\theta)^2))^{-1},$$

则 $\bar{X}$ 的密度与 $f(x,\theta)$ 的相同.

(6) 若总体分布为区间$(0,\theta)$上的均匀分布 $R(0,\theta)$,则 $\sum_{i=1}^{n}X_i/\theta$ 有概率密度

$$f_n(x) = \frac{1}{(n-1)!}\sum_{i=0}^{[x]}(-1)^i\binom{n}{i}(x-i)^{n-1} \qquad (0<x<n).$$

在 $x\leqslant 0$, $x\geqslant n$ 时 $f_n(x)$ 为0,$[x]$ 表示不超过 x 的最大整数.由此不难写出 $\bar{X}$ 的密度.

2.正态总体下若干统计量的抽样分布

正态分布总体是唯一的一个重要总体:除 $\bar{X}$ 外,尚有若干重要统计量的抽样分

布可以求得,并有比较简单的形式.正态分布在统计上的重要性,在相当程度上与此有关.

设总体有分布 $N(\mu,\sigma^2)$, $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为其 i.i.d. 样本.记

$$T_1 = \overline{X},\quad T_2 = \sum_{i=1}^{n}(X_i-\overline{X})^2 = (n-1)S^2,$$

则正态总体有如下特征:

(1) T_1,T_2 独立;T_1 有分布 $N(\mu,\sigma^2/n)$,T_2/σ^2 有分布 χ^2_{n-1}.由此不难写出 S^2 及 S 的密度.需要强调的是,只在总体分布为正态时 T_1 与 T_2 独立才成立.

(2) $\sqrt{n}(\overline{X}-\mu)/S$ 服从自由度为 $n-1$ 的 t 分布,记为 t_{n-1}.自由度 n 的 t 分布 t_n 有密度函数

$$t_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n\pi}}\frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}\left(1+\frac{x^2}{n}\right)^{-(n+1)/2}.$$

这个结果最先由英国统计学家哥色特于 1908 年以学生(Student)的笔名发表在 Biometrika 上.它标志了数理统计学的一个新时代——小样本时代的开端,是有关正态样本的小样本抽样分布一系列重要结果的先声,在数理统计学发展史上具有里程碑式的意义.

(3) 设有两个正态总体 $N(\mu_1,\sigma_1^2)$ 与 $N(\mu_2,\sigma_2^2)$, $X_1,X_2,\cdots,X_{n_1}$ 和 $Y_1,Y_2,\cdots,Y_{n_2}$ 分别是从前者和后者中抽出的 i.i.d. 样本.

记
$$T_1 = \frac{1}{n_1-1}\sum_{i=1}^{n_1}(X_i-\overline{X})^2,$$
$$T_2 = \frac{1}{n_2-1}\sum_{i=1}^{n_2}(Y_i-\overline{Y})^2,$$

则 T_1 与 T_2 独立(在 X 样本与 Y 样本独立时),且比值 $(T_1/\sigma_1{}^2)/(T_2/\sigma_2{}^2)$ 服从自由度为 n_1-1 和 n_2-1(注意次序,分子的自由度在前)的 F 分布,记为 F_{n_1-1,n_2-1}.自由度为 m,n 的 F 分布 $F_{m,n}$ 的密度为

$$f_{m,n}(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{(m+n)}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}m^{m/2}n^{n/2}x^{m/2-1}(mx+n)^{-(m+n)/2}\qquad(x>0),$$

当 $x\leqslant 0$ 时为 0.

(4) 在(3)的前提下,再假定 $\sigma_1{}^2=\sigma_2{}^2$,则

$$\frac{\sqrt{\frac{n_1n_2}{n_1+n_2}}((\overline{Y}-X)-(\mu_2-\mu_1))}{\sqrt{\frac{1}{n_1+n_2-2}((n_1-1)T_1+(n_2-1)T_2)}}$$

服从自由度为 n_1+n_2-2 的 t 分布 $t_{n_1+n_2-2}$.

在精确的抽样分布无法求得时,有两个可以考虑的补救办法.

一是求助于大样本分布,即当样本量 n 趋于无穷时统计量的极限分布,又称渐近分布.最重要的例子是中心极限定理:

设总体分布有期望 μ 和方差 σ^2, $0 < \sigma^2 < \infty$, $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为抽自此总体的 i.i.d. 样本,则当 $n \to \infty$ 时, $\sqrt{n}(\bar{X} - \mu)/\sigma$ 的分布收敛于标准正态($N(0,1)$)分布 Φ.

如果用样本标准差 S 代替 σ,结论仍成立.有不少统计量,其精确分布无法求得,但其(或经过适当变换)大样本分布则常存在,且往往是正态分布或某种比较简单的分布,如 χ^2 分布,这个事实使大样本分布具有重要性.

二是求助于前面对抽样分布一词的意义的解释,这本质上是一种模拟法.设想可以无限制地从原总体中抽样,则由格利文科定理可知,可以通过经验分布的逼近去近似地估计统计量 T 的分布.但由于种种原因(已无可能再从原总体抽样,人力物力时间不允许等),这在实际上往往行不通.1979 年,美国统计学家埃弗朗(B. Efron)提出用已有样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的经验分布 F_n 取代原总体分布.即在上述模拟过程中,把 $X_1^{(i)}, X_2^{(i)}, \cdots, X_n^{(i)}$ 作为从原总体分布中的抽样改为从 F_n 中的 i.i.d. 抽样,其余一切照旧.埃弗朗把这个方法叫做 bootstrap. bootstrap 原意是系鞋带,取这样的名字大概是抽样时拔进拔出的动作与系鞋带时的动作有些相似吧,中译为"自助法".

1.3.5 统计量的充分性

1.定义

定义 8 设样本为 $X = (X_1, X_2, \cdots, X_n)$,统计量 $T = T(X)$.设想把原样本丢掉而只留下统计量 T,那么,一般地讲,这样做会丢失一些信息.若在某些有利情况下,信息毫无丢失,则称 T 是一个**充分统计量**,或者说,统计量 T 有充分性.

这个重要概念是费希尔在 1920 年提出的.他的创见在于:(1) 给"信息量毫无丢失"一个具体的、可操作性的解释;(2) 提出了一种简单易行的充分性判别法.

费希尔把获得样本 $\boldsymbol{X}$ 的过程分解为两步:

第一步是获取 T.设 $T = t$,这事实上是在样本空间中界定了一个子集 $A = \{x: T(x) = t\}$.由此可知样本 $\boldsymbol{X}$ 来自集 A,但不知是哪一个.

第二步是为获取 X,再在 A 内抽样一次.于是 X 所含信息分解成两部分:一部分在 T 内,另一部分在后一抽样内.若后一抽样所含信息为 0,则 X 所含信息全在 T 内,T 有充分性.但如何判定后一部分信息是否为 0 呢?费希尔指出:后一步相当于在条件分布 $\boldsymbol{X} \mid T = t$(给定 $T = t$ 之下 X 的条件分布)中抽样.若此条件分布与总体分布参数无关,则其中当然不会含有与之有关的信息,否则就会含有这些信息.

于是得出结论:统计量 T 有充分性 $\leftrightarrow$ 条件分布 $\boldsymbol{X} \mid T$ 与总体分布参数无关.这个等价命题的右端即可作为统计量有充分性的定义.

2.费希尔的因子分解定理

由于条件分布 $X \mid T$ 不易计算,直接使用上述定义还有麻烦.为此,费希尔提出了一个绕过这一难点的判别法,这就是著名的**因子分解定理**.

定理 2 (因子分解定理) 设样本分布有密度或概率函数 $f(\boldsymbol{x}, \theta)$(离散情况

下，$f(\boldsymbol{x},\theta) = P_\theta(\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$)，$\theta$ 为参数，则统计量 T 为充分的必要充分条件为

$$f(\boldsymbol{x},\theta) = g(T(\boldsymbol{x}),\theta)h(\boldsymbol{x}),$$

其中，因子 h 不依赖于参数 θ；函数 g 虽然依赖于 θ，但只通过统计量 T 而依赖于样本 $\boldsymbol{x}$.

下面举例说明因子分解定理的应用，其中 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 都是抽自有关总体的 i.i.d.样本.

例 1 设正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$，$\theta = (\mu,\sigma^2)$，

$$T_1 = \bar{X},\ T_2 = (\bar{X}, S^2).$$

(1) 当 σ^2 已知时，只有 μ 为未知参数，样本密度为

$$\begin{aligned} f(x) &= (\sqrt{2\pi}\,\sigma)^{-n}\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2\right) \\ &= (\sqrt{2\pi}\,\sigma)^{-n}\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(n-1)S^2\right)\exp\left(-\frac{n}{2\sigma^2}(\bar{X}-\mu)^2\right). \end{aligned} \tag{1-2}$$

由于 σ^2 已知，第 1 因子相当于 $h(x)$，第 2 因子只依赖于 $\bar{X}$ 和 μ，按因子分解定理，$\bar{X}$ 为充分统计量.

(2) 当 μ 和 σ^2 都未知时，T_2 为充分统计量.

(3) 当 μ 已知而 σ^2 未知时，$\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2$ 为充分统计量.

以下的例子将不去一一验证因子分解定理条件的满足，因为这很容易做.

例 2 设总体分布为指数分布时，有密度 $\theta^{-1}e^{-x/\theta}(x>0)$，参数 $\theta>0$，则 $\bar{X}$ 为充分统计量.

例 3 若总体分布为均匀分布 $R(0,\theta)$，$\theta>0$($R(a,b)$ 为区间$[a,b]$上的均匀分布，其密度在此区间上为$(b-a)^{-1}$，此区间外为0)，则样本极大值 $X_{(n)}$ 为充分统计量.若总体分布为均匀分布 $R(\theta_1,\theta_2)$，$-\infty<\theta_1<\theta_2<\infty$，$\theta_1,\theta_2$ 都是未知参数，则$(X_{(1)},X_{(n)})$ 是充分统计量.

例 4 若总体分布为两点分布 $P_\theta\{X=1\} = 1-P_\theta\{X=0\} = \theta$，$0\leqslant\theta\leqslant 1$，则 $\bar{X}$ 为充分统计量.

例 5 若总体分布为泊松分布 $P(\theta)$：$P_\theta(X=k) = e^{-\theta}\theta^k/k!$，$k=0,1,2,\cdots$，参数 $\theta\geqslant 0$，则 $\bar{X}$ 为充分统计量.

当一个统计问题有充分统计量时，可以用它取代原样本去讨论.这意味着可使问题简化.不过，足够简单的充分统计量，其存在的情况不多见——所谓“足够简单的充分统计量”，可理解为其个数与总体分布参数个数相同.如在例 1 的情况(2)中，参数有两个，充分统计量为$(\bar{X},S^2)$，也是两个.

样本个数可以成千上万，但充分统计量个数总维持不变.这种非常有利的情况只有两种：一是样本密度或样本概率函数 $f(\boldsymbol{x},\theta)$ 可表示为

$$f(\boldsymbol{x},\theta) = c(\theta)\exp\left(\sum_{i=1}^{k}Q_i(\theta)T_i(\boldsymbol{x})\right)h(\boldsymbol{x}) \qquad (\theta\in\Theta) \tag{1-3}$$

的形式.此处 $\boldsymbol{x} = (x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 为样本，k 与 n 无关，c、Q_i 只与 θ 有关，而 $T_1,T_2,\cdots,T_k$ 是统计量(Q_i,T_i,h 都可以与 n 有关).根据因子分解定理，$T = (T_1,T_2,\cdots,$

T_k) 是充分统计量. 形如(1-3)式的分布族叫**指数型分布族**, 上述例1、例2、例4、例5都属于这种情形. 另一种情况是**截断型分布族**, 例3属于这种情况.

2　点　估　计

设总体分布依赖未知参数 θ, $\boldsymbol{X}=(X_1,X_2,\cdots,X_n)$ 是样本, 要依据 $\boldsymbol{X}$ 去估计 θ 之值, 就需要构造一个适当的统计量 $\hat{\theta}(\boldsymbol{X})$. 这样, 每当有了样本值 $\boldsymbol{X}$ 时, 代入其中算出 $\hat{\theta}(\boldsymbol{X})$ 的值, 就可以之作为 θ 的估计. 由于被估计量 θ 和统计量 $\hat{\theta}$ 都可用空间中的一个点表示, 故把这种估计叫**点估计**. 用于这个目的的统计量 $\hat{\theta}$ 常称为**估计量**. 由具体的样本值 $\boldsymbol{X}$ 算出的估计量的值 $\hat{\theta}(\boldsymbol{x})$ 称为估计值. 点估计也可以用来求估计 θ 的某已知函数 $g(\theta)$ 之值. 例如, 已知正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$, $\theta=(\mu,\sigma^2)$, 要求估计总体的二阶原点矩 $g(\theta)=\mu^2+\sigma^2$, θ 和 $g(\theta)$ 都可以是一维的或多维的.

2.1　常用的点估计方法

2.1.1　矩估计

矩估计法的基本要点如下:

(1) 用样本原点(中心) 矩去估计总体原点(中心) 矩;

(2) 若要估计的参数可通过总体某些矩的函数表示, 则可用相应的样本矩的同一函数去估计之;

(3) 尽量使用阶数低的矩.

下面举例说明. 在以下诸例中, $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 都是抽自相应总体的i.i.d.样本.

例1　设有正态分布总体 $N(\mu,\sigma^2)$, 求 μ,σ^2 的矩估计.

因它们分别是一阶原点矩和二阶中心矩, 故可分别用一阶样本原点矩 $\bar{X}$ 和二阶样本中心矩 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\bar{X})^2$ 估计之. 因为总体四阶中心矩为 $\mu_4=3\sigma^4$, 即 $\sigma^2=(\mu_4/3)^{1/2}$, 故 σ^2 也可用 $(m_4/3)^{1/2}$ 去估计之, m_4 为样本4阶中心矩. 依上述要点(3), 最好使用较低阶矩的估计, 即使用 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\bar{X})^2$ 估计之.

例2　设有指数分布总体 $\theta^{-1}e^{-x/\theta}$, 求 θ 的矩估计.

因 θ 为总体分布期望(一阶原点矩), 故按矩估计法, 可用 $\bar{X}$ 估计 θ.

例3　设有均匀分布总体 $R(0,\theta)$, 求 θ 的矩估计.

因总体分布期望为 $\theta/2$, 故按矩估计法, 可用 $2\bar{X}$ 估计 θ.

例4　设有均匀分布总体 $R(\theta_1,\theta_2)$, $\theta_1<\theta_2$ 都未知. 求 θ_1,θ_2 的矩估计.

总体期望 $\alpha_1=(\theta_1+\theta_2)/2$,

总体方差 $\mu_2 = (\theta_2 - \theta_1)^2/12$.

按矩估计法,应使用 $\bar{X}$ 和 $m_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2$ 分别估计 θ_1 和 θ_2. 于是,θ_1 和 θ_2 的估计量 $\hat{\theta}_1$ 和 $\hat{\theta}_2$ 可由方程

$$\bar{X} = \frac{(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2)}{2}, \quad m_2 = \frac{(\hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_1)^2}{12}.$$

联立解得:

$$\hat{\theta}_1 = \bar{X} - \sqrt{3m_2}, \quad \hat{\theta}_2 = \bar{X} + \sqrt{3m_2}.$$

矩估计法是英国统计学家皮尔逊在百年前提出的.此法的优点是:在其能用的情况下,计算往往很简单.缺点是有时无法使用(参数不能通过矩简单地表示出);另外,相对于其他估计,如极大似然估计,其效率往往较低.

2.1.2 极大似然估计

定义 1 设样本密度或样本概率函数为 $f(\boldsymbol{x},\theta)$,若固定 $\boldsymbol{x}$ 并将其视为参数 θ 的函数,则称其为**似然函数**.使似然函数达到最大值的 $\hat{\theta}(\boldsymbol{x})$,即

$$f(\boldsymbol{x},\hat{\theta}(\boldsymbol{x})) = \max_{\theta} f(\boldsymbol{x},\theta),$$

称为 θ 的**极大似然估计**(maximum likelihood estimate),常简称为 MLE.若要估计的是 θ 的函数 $g(\theta)$,则 $g(\hat{\theta})$ 称为 $g(\theta)$ 的 MLE.

对于前面的例 1 ~ 例 4,若采用 MLE,结果如何呢?

对于例 1,写出样本$(X_1,X_2,\cdots,X_n)$的密度(1-2)式,易得出 μ 和 σ^2 的 MLE 分别为 $\bar{X}$ 及 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2$.

对于例 2,则易得出 θ 的 MLE 为 $\bar{X}$,例 1、例 2 都与矩估计法的结果相同.

对于例 3,样本 $\boldsymbol{X} = (X_1,X_2,\cdots,X_n)$ 的密度为

$$f(\boldsymbol{X},\theta) = \begin{cases} \theta^{-n} & (X_{(n)} \leqslant \theta), \\ 0 & (X_{(n)} > \theta), \end{cases}$$

其中 $X_{(n)}$ 为样本极大值.因此只有在 $\theta = X_{(n)}$ 时,$f(\boldsymbol{X},\theta)$ 才达到最大.这样,θ 的 MLE 为 $X_{(n)}$.

对于例 4,可以类似地证明:θ_1 和 θ_2 的 MLE 分别为 $X_{(1)}$ 和 $X_{(n)}$.在例 3、例 4 中,MLE 和矩估计的结果都不同.

MLE 作为一般方法提出来,应归功于费希尔.一般地讲,这个估计方法有较高的效率,但在一些情况下较难计算,且大多只适用于参数分布族的情况.不过,近年来也有人将此法用到非参数领域.

除了上述两个方法外,还有一些比较常用的估计法,如贝叶斯(T. Bayes)估计法(见本书"贝叶斯统计"篇)等.

2.2 估计的优良性(Ⅰ)

为估计一个参数,常可有不止一种方法.如正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$ 中的 μ,它是总体分布的期望,可用 $\bar{X}$ 估计;它也是总体分布的中位数,又可用样本中位数 m 估计;此外,还可以找到其他一些估计法,如截尾平均等.这些估计中哪一个更好呢?这个问题的回答牵涉以下两点:

(1) 如何拟定某种合适的、衡量估计量优良性的标准;

(2) 在给定标准下,如何找出最好的那个估计.

"哪一个更好"的问题还可以提得稍宽一些,例如,是否可以提出某些认为"好"的应具备的性质,这样可去考察某一估计是否具有这一性质,或修正之使其具有这一性质,而又不一定与某一最优化准则联系起来呢?所有这些问题,都属于数理统计学中"点估计"这个分支的研究范围.本节及下节将讨论与此有关的内容.本节在样本量 n 固定的情况下讨论有关性质,统计学中称为"小样本"性质.下一节则在 $n\to\infty$ 的情况下考察有关性质,统计学中称为"大样本"性质或"渐近"性质.值得注意的是,这里讲的"大、小样本"不是指样本量的绝对大小,而是区分样本量固定(小样本)和趋于无穷(大样本)两种情况.

2.2.1 估计的无偏性

1. 定义

定义 2 设样本为 $\boldsymbol{X}$,θ 为总体分布参数,$\widehat{g}(\boldsymbol{X})$ 是 $g(\theta)$ 的一个估计量,若

$$E_\theta(\widehat{g}(\boldsymbol{X})) = g(\theta) \qquad (\theta\in\Theta),$$

其中 Θ 为参数空间,则称 $\widehat{g}(\boldsymbol{X})$ 是 $g(\theta)$ 的一个**无偏估计**,或称 $\widehat{g}(\boldsymbol{X})$ 具有**无偏性**.

$\widehat{g}(\boldsymbol{X})$ 具有无偏性并不意味着对于任何样本 $\boldsymbol{X}$,$\widehat{g}(\boldsymbol{X})$ 都能给出 θ 的准确估计值,而只是说估计有时偏大,有时偏小,但"平均讲"偏差为0.因此,无偏性可解释为不存在系统偏差.无偏性在实用中是否有意义,由问题的性质确定.只有同一估计在同一问题中反复使用多次,且从实用效果看正负偏差可以抵消时,无偏性才有意义,否则就没有意义.从理论上看,由于无偏性在数学上较容易处理,故在点估计中研究也比较多.

例 5 分别以 μ 和 σ^2 记正态分布总体的期望和方差,$X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为i.i.d.样本,则对于参数 μ 和 σ^2,按矩估计法,可用 $\bar{X}$ 估计 μ,用 $m_2=\dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\bar{X})^2$ 估计 σ^2.$\bar{X}$ 就是无偏估计,而 m_2 不是.因

$$E(nm_2) = \sum_{i=1}^{n}EX_i^2 - nE(\bar{X})^2,$$

由

$$EX_i^2 = \mu^2+\sigma^2,$$

$$E(\bar{X})^2 = (E\bar{X})^2 + \operatorname{var}(\bar{X}) = \mu^2 + \frac{\sigma^2}{n},$$

得

$$E(nm_2) = (n-1)\sigma^2,$$

故

$$E(m_2) = \frac{(n-1)\sigma^2}{n} < \sigma^2,$$

m_2 不是无偏.将 m_2 改用 $S^2 = nm_2/(n-1)$ 即得无偏估计.这正是把 S^2 定义为样本方差的原因.

上例包括了一些常见情况(如例 1 ~ 例 3).

2. 偏差的修正

当一个估计量有偏时,有时可通过简单的修正消除之.一个显著的例子是例 5 中把 m_2 修正为 S^2.但在许多情况下,不存在这样简单的修正.例如,用样本中位数估计总体分布中位数时,除非假定总体分布对称,否则,此估计不是无偏,也没有简单的修正方法使之成为无偏.

1956 年,魁诺依勒(M.H.Quenouille)提出了一种降低偏差的方法,可适用于比较普遍的情况.

设样本为 $X_1, X_2, \cdots, X_n$,用 $T_n = T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 去估计 θ 时,有

$$E_\theta(T_n) - \theta = \frac{a_1}{n} + \frac{a_2}{n^2} + \frac{a_3}{n^3} + \cdots. \tag{2-1}$$

上式右边将偏差用 n^{-i} 幂次的形式表示出来了.魁诺依勒提出,从样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 中"切去"X_i,得 $X_1, X_2, \cdots, X_{i-1}, X_{i+1}, \cdots, X_n$ 共 $n-1$ 个样本,利用它们可得 θ 的估计 $T_{n-1,i} = T_{n-1}(X_1, X_2, \cdots, X_{i-1}, X_{i+1}, \cdots, X_n)\quad(i = 1,2,\cdots,n)$.

求其平均值 $\bar{T}_{n-1} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} T_{n-1,i}}{n}$,然后令

$$T_n' = nT_n - (n-1)\bar{T}_{n-1}. \tag{2-2}$$

按式(2-1),应有

$$E(T_{n-1,i}) - \theta = \frac{a_1}{n-1} + \frac{a_2}{(n-1)^2} + \cdots.$$

由此结合式(2-1)、式(2-2),易得

$$E(T_n') - \theta = -\frac{a_2}{n^2} + \cdots.$$

就是说,原估计 T_n 的偏差达到 n^{-1} 的数量级,而改用 T_n' 后,降为 n^{-2} 的数量级,有了改善.这种方法称为**刀切法**(jacknife),T_n' 称为 θ 的刀切估计.

例 6 用刀切法求方差 σ^2 的估计 m_2.

记 $s_i = \sum_{j=1}^{n} X_j^i,\ i = 1,2$,有

$$T_{n-1,i} = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1,j\neq i}^{n}\left(X_j - \frac{s_1 - X_i}{n-1}\right)^2$$

$$= \frac{1}{n-1}\left(s_2 - X_i^2 - \frac{(s_1 - X_i)^2}{n-1}\right)$$

$$= \frac{1}{n-1}\left(s_2 - (n-1)^{-1} n X_i^2 + (n-1)^{-1} 2 s_1 X_i\right) \qquad (i = 1, 2, \cdots, n).$$

由上式,经简单计算,得

$$T_n' = (n-1)^{-1}\left(s_2 - \frac{s_1^2}{n}\right) = s^2,$$

这正是 σ^2 的无偏估计.

2.2.2 一致最小方差无偏估计

一个参数 θ 可以有许多无偏估计.例如为估计正态总体的期望、样本均值和样本中位数都是无偏估计.于是就有一个在无偏估计之间比较优劣的问题.一个常用的准则是:方差小者为优.因为方差小意味着估计量常取为 θ 附近的值,因而有较大的精度.这个考虑引导到下述定义.

定义 3 设 $\hat{g}(X)$ 为 $g(\theta)$ 的一无偏估计,如果对于 $g(\theta)$ 的任一无偏估计 $\tilde{g}(X)$,都成立

$$\mathrm{var}_\theta(\hat{g}(X)) \leqslant \mathrm{var}_\theta(\tilde{g}(X)) \qquad (\forall \theta \subset \Theta), \tag{2-3}$$

则称 $\hat{g}(X)$ 是 $g(\theta)$ 的**一致最小方差无偏估计**(uniformly minimum variance unbiased estimate),简称为 UMVUE."一致"的意思是式(2-3)要对于参数空间 Θ 中的每个 θ 值都成立.

UMVUE 存在的情况不多,因为方差对于一切 $\theta \in \Theta$,一致地达到最小这个条件要求很高.寻求 UMVUE的方法有两种:一是就一个给定的估计(多是常见且认为性能好的估计)去验证它是否是 UMVUE,一是利用充分统计量.下面分别进行讨论.

1.克拉默-拉奥不等式法

这个方法的思想是:先对无偏估计的方差估计出一个不可逾越的下界;若某一无偏估计 $\hat{g}(X)$ 其方差确实达到这一下界,那它就是 UMVUE.

设样本 X 有密度$f(x,\theta)$(也可以是概率函数),θ 是一维参数,则在一定条件下,对于 $g(\theta)$ 的任一无偏估计 $\hat{g}(\boldsymbol{X})$,成立

$$\mathrm{var}_\theta(\hat{g}(\boldsymbol{X})) \geqslant \frac{(g'(\theta))^2}{E_\theta\left(\frac{\partial \log f(\boldsymbol{X},\theta)}{\partial \theta}\right)^2}. \tag{2-4}$$

这个不等式是印度统计学家拉奥(C.R.Rao)和瑞典统计学家克拉默(H.Cramer)在1945年和1946年独立得到的,如今就以他们的名字命名,称为克拉默-拉奥不等式法,简称 CR不等式法.固定 θ 时,集$\{\boldsymbol{X}:f(\boldsymbol{X},\theta) > 0\}$称为样本分布当参数为 θ 时的**支撑**.一般地,支撑可能依赖 θ.CR 不等式中的"一定条件",包含函数 $f(\boldsymbol{X},\theta)$ 及

$g(\theta)$有一定的光滑性，以及要求支撑与θ无关．支撑与θ无关的一个重要例子是正态分布$N(\mu,\sigma^2)$，不管参数值μ,σ^2如何，其支撑总是$(-\infty,\infty)$．支撑与θ有关的例子是截断分布族，例如均匀分布族$\{R(0,\theta),\theta>0\}$．

一个重要的特例是$\boldsymbol{X}=(X_1,X_2,\cdots,X_n)$，而$X_1,X_2,\cdots,X_n$为从总体中抽出的i.i.d.样本．这时，若以$h_\theta$记总体密度，将有$f(\boldsymbol{X},\theta)=h_\theta(X_1)h_\theta(X_2)\cdots h_\theta(X_n)$而$\log f(\boldsymbol{X},\theta)=\sum_{i=1}^{n}\log h_\theta(X_i)$．由于$X_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,X_n$同分布，以此代入式(2-4)，得

$$\operatorname{var}_\theta(\widehat{g}(\boldsymbol{X}))\geqslant\frac{(g'(\theta))^2}{nI(\theta)},$$

$$I(\theta)=E_\theta\left(\frac{\partial\log h_\theta(X_1)^2}{\partial\theta}\right).\tag{2-5}$$

$I(\theta)$称为**费希尔信息量**．它是总体分布的一个特性．直观说，它的意思是：就该总体分布而言，一个样本能提供分布参数多少信息．按式(2-5)可以进一步解释如下：$I(\theta)$愈大，表示$\operatorname{var}_\theta(\widehat{g}(\boldsymbol{X}))$的下界可能愈低，即表示参数更易被估准．参数之易被估准反映出样本含有参数更多的信息量．也可以这样看：$I(\theta)$反映了密度$f_\theta(\boldsymbol{x})$随θ变化的程度，变化愈快，表示$f_\theta(\boldsymbol{x})$对θ的变化很灵敏，因而样本$\boldsymbol{x}$中包含θ的信息也就愈多．

例7　正态总体$N(\theta,\sigma^2)$，σ^2已知，求θ的估计．设$X_1,X_2,\cdots,X_n$为i.i.d.样本．此处

$$h_\theta(X_1)=(\sqrt{2\pi}\,\sigma)^{-1}\exp\frac{-(X_1-\theta)^2}{2\sigma^2},$$

因而，

$$I(\theta)=E_\theta\left(\frac{X_1-\theta}{\sigma^2}\right)^2=E_\theta\frac{(X_1-\theta)^2}{\sigma^4}=\frac{\sigma^2}{\sigma^4}=\sigma^{-2}.$$

按式(2-5)，对θ的任一无偏估计，其方差不能小于$(n\sigma^{-2})^{-1}=\sigma^2/n$．但无偏估计$\overline{X}$的方差正好达到这个下界，故它就是$\theta$的UMVUE.

本例中费希尔信息量$I(\theta)$与方差σ^2成反比．这反映了如下事实：方差愈大，均值愈难被估准．这个特例印证了把$I(\theta)$称为“信息量”的合理性．

对于指数分布、二项分布和泊松分布的总体，其参数θ都是总体期望．用CR不等式不难证明：i.i.d.样本的样本均值是θ的UMVUE.

对于正态总体$N(\mu,\sigma^2)$的方差估计，若μ已知，则用CR不等式不难证明：i.i.d.样本$X_1,X_2,\cdots,X_n$之下，$\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu)^2/n$是$\sigma^2$的UMVUE．若$\mu$也未知，则情况较复杂，因这时未知参数$(\mu,\sigma^2)$不是一维的，式(2-5)不可用，但用高维参数的CR不等式(这里从略)仍可证明：在这个情况下，样本方差S^2是σ^2的UMVUE.

2.充分完备统计量法

这个方法基于如下的事实：如有充分统计量T存在，则在寻找UMVUE时，只须考察基于T的估计就够了．事实上，因T为充分，$E_\theta(\widehat{g}(X)\mid T)$与$\theta$无关，可记为

$g^*(T)$,它作为 $g(\theta)$ 的估计为无偏估计(因为 $E_\theta(E_\theta(\hat{g}(X)\mid T)) = E_\theta(\hat{g}(X)) = g(\theta)$),而且 $g^*(T)$ 的方差不超过 $\hat{g}(X)$ 的方差,即

$$\begin{aligned}\mathrm{var}_\theta(\hat{g}(X)) &= E_\theta(\hat{g}(X) - g(\theta))^2 \\ &= E_\theta(\hat{g}(X) - g^*(T))^2 + E_\theta(g^*(T) - g(\theta))^2 \\ &= E_\theta(\hat{g}(X) - g^*(T))^2 + \mathrm{var}_\theta(g^*(T)) \geqslant \mathrm{var}_\theta(g^*(T)),\end{aligned}$$

因此,若基于 T 的无偏估计只有唯一的一个 $g^*(T)$,则 $g^*(T)$ 就是 $g(\theta)$ 的 UMVUE.

"基于 T 的无偏估计唯一"等价于"基于 T 的、0 的无偏估计只有 0". 即由"$E_\theta(h(T)) = 0$,对于一切 $\theta \in \Theta$",可推出 $h(T) = 0$. 满足这后一条件的统计量 T 称为完备统计量(T 的完备性定义中不必要求 T 充分,虽则此处只用到充分统计量). 总之,若 T 是一个充分且完备的统计量,而 $g^*(T)$ 是 $g(\theta)$ 的无偏估计,则 $g^*(T)$ 就是 $g(\theta)$ 的 UMVUE.

如何去判定一个统计量 T 是否是完备的呢?这问题涉及数学方面的内容较多,不能详细论述,这里只给出一个有关的重要结论:设样本分布族是指数型的,即其密度有式(1-3)的形式,则当集合

$$A = \{(Q_1(\theta), Q_2(\theta), \cdots, Q_k(\theta)) : \theta \in \Theta\} \tag{2-6}$$

作为 $\mathbf{R}^k$ 的子集有内点存在时,统计量 $T = T(X) = (T_1(X), T_2(X), \cdots, T_k(X))$ 是**完备统计量**. 注意,按因子分解定理,T 也是充分统计量(这不要求 A 有内点),故 T 为充分完备统计量.

例 8　设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为抽自正态总体 $N(\mu, \sigma^2)$ 的 i.i.d. 样本. 记

$$T = (T_1, T_2),$$

其中

$$T_1 = \bar{X},\ T_2 = X_1^2 + X_2^2 + \cdots + X_n^2,$$

则样本密度为

$$\begin{aligned}&\prod_{i=1}^n (\sqrt{2\pi}\,\sigma)^{-1}\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(X_i - \mu)^2\right) \\ &= (2\pi)^{-n/2}\sigma^{-n}\exp\left(\frac{-n\mu^2}{2\sigma^2}\right)\exp\left(\frac{n\mu}{\sigma^2}T_1 - \frac{1}{2\sigma^2}T_2\right).\end{aligned}$$

它有式(1-3)的形状,其中

$$Q_1(\theta) = \frac{n\mu}{\sigma^2},\quad Q_2(\theta) = -\frac{1}{2\sigma^2}.$$

不难看出:式(2-6)定义的集 A 有内点,故 $T = (T_1, T_2)$ 为充分完备统计量. 因为 T_1 和 $S^2 = (T_2 - nT_1^2)/(n-1)$ 分别是 μ 和 σ^2 的无偏估计且都只依赖 T,故它们分别是 μ 和 σ^2 的 UMVUE.

对于总体分布为指数分布、二项分布或泊松分布等情况,在 i.i.d. 样本之下,用本法可以证明:样本均值 $\bar{X}$ 都是总体参数 θ 的 UMVUE.

例 9　设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为抽自均匀分布 $R(0, \theta)$ 的 i.i.d. 样本,求 θ 的估计. 若

记

$$T = \max_{1 \leq i \leq n} X_i,$$

则 $(n+1)T/n$ 为 θ 的无偏估计，且 T 为充分统计量. 若能证明 T 也为完备统计量，则 $(n+1)T/n$ 就是 θ 的 UMVUE. 因为样本分布不是指数型，前述的判定方法不可用. 但本例不难直接验证：T 的密度为 $n\theta^{-n}t^{n-1}$（当 $0 < t < \theta$ 时），此外为 0，故若 $h(T)$ 是为 0 的无偏估计，则将有

$$\int_0^\theta n\theta^{-n}t^{n-1}h(t)\mathrm{d}t = 0 \qquad (\theta > 0),$$

即

$$\int_0^\theta t^{n-1}h(t)\mathrm{d}t = 0 \qquad (\theta > 0).$$

对上式求导，得

$$t^{n-1}h(t) = 0 \qquad (t > 0),$$

因而 $h(t) = 0 \quad (t > 0)$. 这就证明了 T 的完备性.

2.2.3 无偏估计的效率

定义 4 设 $\hat{g}_1(X)$ 和 $\hat{g}_2(X)$ 是 $g(\theta)$ 的两个无偏估计，则其方差之比

$$e_\theta(\hat{g}_1, \hat{g}_2) = \frac{\mathrm{var}_\theta(\hat{g}_2(X))}{\mathrm{var}_\theta(\hat{g}_1(X))} \tag{2-7}$$

称为估计量 $\hat{g}_1$ 相对于 $\hat{g}_2$ 的（相对）效率. 当 $e_\theta(\hat{g}_1, \hat{g}_2) > 1$ 时，$\hat{g}_1$ 相对于 $\hat{g}_2$ 来说更有效一些. 当然，这是在以方差为比较标准上说的.

如果 $\hat{g}_2$ 为 $g(\theta)$ 的 UMVUE，则对于任何无偏估计 $\hat{g}_1$，总有 $e_\theta(\hat{g}_1, \hat{g}_2) \leq 1$. 这时可以把 $e_\theta(\hat{g}_1, \hat{g}_2)$ 称为 $\hat{g}_1$ 的（绝对）效率. 效率愈接近 1 愈好. 如果估计不是无偏，则其方差不能作为衡量其优良性的标准，因为偏差（$|E(\hat{g}_1(X)) - g(\theta)|$）大了，方差小也不能保证估计 $\hat{g}_1$ 能靠近 $g(\theta)$. 在这种情况下效率定义式(2-7)就不能用.

例 10 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为抽自均匀分布 $R(0,\theta)$ 的 i.i.d. 样本. 为估计 θ，有两个无偏估计：

$$\hat{g}_1 = 2\bar{X}, \quad \hat{g}_2 = (n+1)\max_{1 \leq i \leq n} \frac{X_i}{n}.$$

简单计算表明：

$$\mathrm{var}_\theta(\hat{g}_1) = \frac{1}{3n}\theta^2, \quad \mathrm{var}_\theta(\hat{g}_2) = \frac{1}{n(n+2)}\theta^2. \tag{2-8}$$

因此

$$e_\theta(\hat{g}_1, \hat{g}_2) = \frac{3}{n+2}.$$

因为 $\hat{g}_2$ 为 UMVUE，所以上式表示估计量 $\hat{g}_1$ 的效率. 当 $n = 1$ 时，e_θ 为 1（这时 $\hat{g}_1 =$

$\hat{g}_2$)；当 $n > 1$ 时，e_0 小于1，且随 $n \to \infty$ 而趋于0. 这表明：当样本量很大时，若用矩估计法去估计 θ，则相对于用 MLE，信息量有很大的损失.

本例也说明在截断分布族之下，CR 不等式失效. 事实上，按式(2-8)，$\hat{g}_2$ 的方差为 n^{-2} 的数量级，而对于 CR 不等式成立的情况，这个数量级只能为 n^{-1}. 这意味着，截断分布的参数更容易估准. 这一点与直观感觉符合.

2.3 估计的优良性(Ⅱ)

2.3.1 估计的相合性

定义5 设 $X = (X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 为样本，$\hat{g}(X)$ 是 $g(\theta)$ 的一个估计. 如果当样本量 $n \to \infty$ 时，$\hat{g}(X)$ 在某种意义下收敛于 $g(\theta)$，则称 $\hat{g}(X)$ 是 $g(\theta)$ 的在该意义下的**相合估计**.

在概率论中最重要的收敛意义有两种：依概率收敛(记为 $\to \text{in}P$) 和以概率1收敛(记为 $\to$ a.s.). 与此两种意义相应的相合性，分别称为弱相合和强相合. 因此，说 $\hat{g}$ 是 $g(\theta)$ 的弱相合估计，是指当 $n \to \infty$ 时

$$\hat{g} \to g(\theta) \qquad (\text{in}P, \forall \theta \in \Theta),$$

其中 Θ 为参数空间，即对于任给的 $\varepsilon > 0$，有

$$\lim_{n \to \infty} P_\theta(|\hat{g} - g(\theta)| \geqslant \varepsilon) = 0 \qquad (\theta \in \Theta).$$

说 $\hat{g}$ 是 $g(\theta)$ 的**强相合估计**，是指

$$\lim_{n \to \infty} \hat{g}(X) = g(\theta) \qquad (\text{a.s.}, \quad \theta \in \Theta),$$

或者说，

$$P_\theta(\hat{g}(X) \to g(\theta)) = 1 \qquad (\theta \in \Theta).$$

如果 $\hat{g}$ 为强相合估计，则 P_θ 必为弱相合的，反过来不成立.

如果一个估计 $\hat{g}$ 是相合的，则只要保证样本量 n 足够大，就有充分的把握把 $g(\theta)$ 估计到任何所想要的精度. 但实际上，样本量不一定很大，而且，即使知道某一估计 $\hat{g}$ 为相合的，一般也搞不清楚为使 $\hat{g}$ 与 $g(\theta)$ 接近到所需的程度样本量要多大才行. 所以，相合性这个性质，实用的意义还是有限的. 其意义更恰当的是从反面去看：如果一个估计 $\hat{g}$ 没有相合性，则意味着不论样本量多大，$\hat{g}$ 与被估计的 $g(\theta)$ 总是保持着相当的差距. 这样的估计人们会觉得是不可取的. 因此，相合性是衡量一个估计的优良性的重要方面.

1. 矩估计的相合性

矩估计的相合性是建立在科尔莫戈罗夫(A. H. Kolmogorov) 强大数律的基础上

的.

定理 1 （科尔莫戈罗夫强大数律）　若变量 $X_1, X_2, \cdots$ 为 i.i.d.，且其公共分布有期望 a，则当 $n \to \infty$ 时，

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \to a \qquad (\text{a.s.}).$$

现设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为自某总体中抽出的 i.i.d. 样本，分别以 α_k 和 μ_k 表示总体分布的 k 阶原点矩和 k 阶中心矩，样本 k 阶原点矩和中心矩分别为

$$a_k(n) = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i^k}{n}, \quad m_k(n) = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X}_n)^k}{n},$$

其中 $\bar{X}_n = (X_1 + X_2 + \cdots + X_n)/n$.

由科尔莫戈罗夫强大数律可推出，

$$a_k(n) \to \alpha_k \qquad (\text{a.s.}),$$

即 $a_k(n)$ 是 α_k 的强相合估计. 如果总体参数 θ 的某一函数 $g(\theta)$ 可表为有限个总体原点矩 $\alpha_{k_1}(\theta), \alpha_{k_2}(\theta), \cdots, \alpha_{k_r}(\theta)$ 的连续函数 $h(\alpha_{k_1}(\theta), \alpha_{k_2}(\theta), \cdots, \alpha_{k_r}(\theta))$，则其矩估计 $h(a_{k_1}(n), a_{k_2}(n), \cdots, a_{k_r}(n))$ 是 $g(\theta)$ 的强相合估计. 由于中心矩可表为若干个原点矩的多项式，而多项式是连续函数，故上述结论适用于总体中心矩. 就是说样本中心矩是同阶总体中心矩的强相合估计. 上述结论可进一步推广为：若 $g(\theta)$ 可表示为有限个总体原点和中心矩的连续函数 $h(\alpha_{k_1}(\theta), \alpha_{k_2}(\theta), \cdots, \alpha_{k_r}(\theta), \mu_{l_1}(\theta), \mu_{l_2}(\theta), \cdots, \mu_{l_d}(\theta))$，则其矩估计 $h(a_{k_1}(n), a_{k_2}(n), \cdots, a_{k_r}(n), m_{l_1}(n), m_{l_2}(n), \cdots, m_{l_d}(n))$ 是 $g(\theta)$ 的强相合估计. 上述论证证明：矩估计在很一般的情况下是强相合的，因而也是弱相合的.

这一结论可用于一些常见的例子中，如本章的例 1 ~ 例 5. 又如，用样本变异系数 $S/\bar{X}$、样本偏度和峰度系数 $m_3/m_2^{3/2}$ 和 m_4/m_2^2 去估计总体分布的相应特征，都是强相合估计.

2. MLE 的相合性

与矩估计比，MLE 相合性的证明要复杂得多，且要加上一些正则性条件，其细节此处不作介绍. 第一个有关 MLE 弱相合的证明是克拉默在其著作《统计学数学方法》中给出的. 而首先在一般条件下研究 MLE 的强相合性，是 1949 年沃尔德作出的. 之后还有一些学者对此作了深入的研究. 这里只指出：在两种最重要的情况——指数型分布族和截断分布族之下，在很一般的条件下 MLE 的相合性也成立.

有一些估计不属于矩估计或 MLE，关于它们的相合性，就不能引用上述一般结论，而需要用针对该情况的方法去证明. 例如，用样本(i.i.d.) 的中位数去估计总体中位数，就不能引用上述结论. 但可以证明：在总体中位数唯一时，样本中位数是它的强相合估计. 更一般地，总体分布的 p 分位数($0 < p < 1$，分布 F 的 p 分位数是指满足条件 $F(\mu_p) = p$ 的数 μ_p) 可用样本 p 分位数 $X_{([(n+1)p])}$ 去估计($X_{(1)} \leqslant X_{(2)} \leqslant \cdots \leqslant X_{(n)}$ 是次序统计量，见式(1-1). $[(n+1)p]$ 是不超过 $(n+1)p$ 的最大整

数).同样可以证明:在总体 p 分位数唯一时,样本 p 分位数是p 的强相合估计.

2.3.2 估计的渐近正态性

1. 定义

定义 6 设 $X=(X_1,X_2,\cdots,X_n)$ 为样本,$\hat{g}(X)$ 是 $g(\theta)$ 的一个估计.若存在与参数 θ 有关的量$\sigma_n^2(\theta)>0$,使当样本量 $n\to\infty$ 时,$(\hat{g}(X)-g(\theta))/\sigma_n(\theta)$ 依分布收敛于标准正态分布 $N(0,1)$,记为

$$\frac{\hat{g}(X)-g(\theta)}{\sigma_n(\theta)}\xrightarrow{\text{d.}}N(0,1),$$

其中 $\xrightarrow{\text{d.}}$ 表示依分布收敛,则称估计量 $\hat{g}(X)$ 为渐近正态的,或者说有渐近正态性.

对固定的样本量 n,估计量 $\hat{g}(X)$ 的确切分布通常难于求得,而当 $n\to\infty$ 时,其渐近分布倒常存在,且有比较简单的形式.渐近正态就是其中最重要的一个例子.下面还会看到收敛于其他极限分布的例子.

2. 最优渐近正态估计

如果近似地把 $N(0,1)$ 当作$(\hat{g}(X)-g(\theta))/\sigma_n(\theta)$ 的分布,则 $\sigma_n{}^2(\theta)$ 可近似地视为 $\hat{g}(X)$ 的方差.方差愈小愈好.基于这一点,可得出估计量的一个大样本比较.设 $\hat{g}(X)$ 和 $g^*(X)$ 是 $g(\theta)$ 的两个渐近正态估计,即

$$\frac{\hat{g}(X)-g(\theta)}{\sigma_n(\theta)}\xrightarrow{\text{d.}}N(0,1),$$

$$\frac{g^*(X)-g(\theta)}{\sigma_n{}^*(\theta)}\xrightarrow{\text{d.}}N(0,1).$$

当 $\sigma_n^*(\theta)/\sigma_n(\theta)$(当 $n\to\infty$ 时)收敛于一个小于1的极限时,称 g^* 渐近地优于 $\hat{g}$.如果 g^* 渐近地优于任何其他一个渐近正态估计,则称它是最优渐近正态(best asymptotic normal)估计,简称 BAN 估计.

参数估计大样本理论的一个重要结果是:在一定的正则性条件下,MLE 是 BAN 估计,其渐近方差可取为$(g'(\theta))^2/(nI(\theta))$,$I(\theta)$ 是费希尔信息量.这个结果可以解释为:在极限的状态下,MLE 的方差渐近地达到了 CR 不等式的下界(见式(2-5)).在样本量 n 固定时,这个界限只在几个特殊例子中能达到.

3. 矩估计的渐近正态性

先考察样本原点矩 $a_k(n)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_i^k$(作为总体原点矩 α_k 的估计)的情况.

若样本 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为 i.i.d.,则 $X_1^k,X_2^k,\cdots,X_n^k$ 也是 i.i.d.,按林德伯格(Y.W.Lindeberg)中心极限定理,注意到 X_1^k 的方差为 $\alpha_{2k}-\alpha_k^2$,有

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} X_i^k - n\alpha_k}{\sqrt{n(\alpha_{2k} - \alpha_k^2)}} \xrightarrow{\text{d.}} N(0,1).$$

上式可写为

$$\frac{a_k(n) - \alpha_k}{\sqrt{\frac{1}{n}(\alpha_{2k} - \alpha_k^2)}} \xrightarrow{\text{d.}} N(0,1).$$

由此得知，$a_k(n)$ 为 α_k 的渐近正态估计，其渐近方差(在此其实是确切方差)为

$$\sigma_n^2(\theta) = \frac{\alpha_{2k} - \alpha_k^2}{n}.$$

更进一步地，设 $g(\theta)$ 可表为若干个总体原点矩的函数 $h(\alpha_{k_1}, \alpha_{k_2}, \cdots, \alpha_{k_r})$，而 h 对各变量有一阶偏导数，$g(\theta)$ 的矩估计为 $\hat{g}(\boldsymbol{X}) = h(a_{k_1}(n), a_{k_2}(n), \cdots, a_{k_r}(n))$，则

$$\begin{aligned}\hat{g}(\boldsymbol{X}) - g(\theta) &= h(a_{k_1}(n), a_{k_2}(n), \cdots, a_{k_r}(n)) - h(\alpha_{k_1}, \alpha_{k_2}, \cdots, \alpha_{k_r}) \\ &= \sum_{j=1}^{r} \frac{\partial h}{\partial \alpha_{k_j}}(a_{k_j}(n) - \alpha_{k_j}) + \text{高阶项}.\end{aligned} \tag{2-9}$$

可以证明，在求 $\hat{g}(\boldsymbol{X}) - g(\theta)$ 的极限分布时，高阶项不起作用，即 $\hat{g}(\boldsymbol{X}) - g(\theta)$ 的极限分布与上式右边第一项的极限分布相同. 这一项是 $a_{k_1}(n) - \alpha_{k_1}, \cdots, a_{k_r}(n) - \alpha_{k_r}$ 的线性组合，且可以证明其极限分布为正态的，其渐近方差就是这个线性和的方差 $\sigma_n^2(\theta)$. 可计算得

$$\sigma_n^2(\theta) = n^{-1} \sum_{i,j=1}^{r} \frac{\partial h}{\partial \alpha_{k_i}} \frac{\partial h}{\partial \alpha_{k_j}} (\alpha_{k_i + k_j} - \alpha_{k_i}\alpha_{k_j}). \tag{2-10}$$

由于中心矩可表示为原点矩的多项式，故由上述结论可知：样本中心矩 m_k 作为总体中心矩 μ_k 的估计，为渐近正态估计. 更一般地，若 $g(\theta)$ 可表为若干个原点及中心矩的可微函数，则其矩估计也将是渐近正态的. 由此可知，一些常见的估计量，如用 $\bar{X}$ 估计总体均值、用样本方差估计总体方差，以及用样本变异系数、样本偏度和峰度系数等去估计相应的总体特征，其估计都是渐近正态估计.

为按式(2-10)计算渐近方差，须把有关估计量表示成只与样本原点矩有关的形式. 例如，样本变异系数 $S/\bar{X}$ 可表为 $\frac{1}{a_1(n)}\sqrt{n/(n-1)}\sqrt{a_2(n) - a_1^2(n)}$. 因子 $\sqrt{n/(n-1)}$ 不影响渐近分布，可以略去.

4. MLE 的渐近正态性

证明估计量为渐近正态的一般方法，是将其设法分解为类似于式(2-9)的形式，其主要部分为独立变量和，可用中心极限定理计算，而余项有更高的阶，可忽略不计. 但是，在较复杂的情况下，获得这种分解式，以及证明余项可忽略，都非易事.

需要个别情况个别处理. MLE 属于这种情况. 最早关于 MLE 渐近正态性的证明,是克拉默于 1946 年在其著作《统计学数学方法》中作出的:设总体密度为 $f(x,\theta)$(也可以是概率函数),$X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为 i.i.d. 样本,$\hat{\theta}_n$ 为 θ 的 MLE,在 $f(x,\theta)$ 满足某些条件(其中有支撑与 θ 无关)时,$\hat{\theta}_n$ 有渐近正态性:

$$\sqrt{nI(\theta)}(\hat{\theta}_n - \theta) \xrightarrow{\text{d.}} N(0,1),$$

其中 $I(\theta)$ 为费希尔信息量. 在 θ 为多维参数时也有类似结果. 对于均匀分布 $R(0,\theta)$,因不满足支撑与 θ 无关的条件,其 MLE $\hat{\theta}_n = \max\limits_{1\leqslant i\leqslant n} X_i$ 不是渐近正态分布. 此例的 $\hat{\theta}_n$ 有另一种类型的渐近分布,叫极值分布,此处不再详细论述了.

矩估计与 MLE 虽同为渐近正态分布(在一定条件下),但 MLE 为 BAN 估计,而矩估计一般不是. 故从这个大样本准则看,MLE 优于矩估计.

5. 样本中位数的渐近正态性

设 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为自某总体中抽出的 i.i.d. 样本,m_n 为样本中位数,并以其作为总体中位数 ξ 的估计. 假定总体分布有密度函数 f,$f(\xi)>0$ 且 f 在 ξ 处连续,则有

$$2f(\xi)\sqrt{n}(m_n - \xi) \xrightarrow{\text{d.}} N(0,1), \tag{2-11}$$

即 m_n 为渐近正态分布,其渐近方差为 $(4f^2(\xi)n)^{-1}$.

如果总体分布为正态分布 $N(\xi,\sigma^2)$,则 $\bar{X}$ 和 m_n 都是 ξ 的渐近正态估计,其渐近方差(对于 $\bar{X}$,为真正的方差)分别为 σ^2/n 和 $\pi\sigma^2/(2n)$,二者的比值为 $2/\pi$. 这可以解释为:在正态总体下,用样本中位数去估计总体期望值,其效率大致只有用 $\bar{X}$ 时的 $2/\pi$,即有近 1/3 的样本信息被浪费了. 但若总体分布为其他分布,情况就可能两样. 例如,若总体分布为拉普拉斯分布,其密度函数为 $(2\sigma)^{-1}\exp(-|x-\xi|/\sigma)$,$-\infty<\xi<\infty$,$\sigma>0$ 为未知参数,则 ξ 同时是其中位数和期望,可以用 m_n 或 $\bar{X}$ 去估计. 易算出 m_n 的渐近方差为 σ^2/n,而 $\bar{X}$ 则为 $2\sigma^2/n$. 故在此例中,$\bar{X}$ 的效率大约只有 m_n 的一半.

即使在正态场合,m_n 也有一个 $\bar{X}$ 不具备的优点,即它受个别异常值的影响小. 异常值一般是指样本中异常之大或异常之小的值,它可能由于某种错误(观测时仪器未校准,记录错误之类)而来,$\bar{X}$ 受这种值的影响则较大. m_n 对少量异常值不敏感这一特性,称为**稳健性**. 由于在实际工作中异常值往往难于避免,稳健性较好的估计受到实际工作者的重视.

总之,衡量一个估计的优良性可以有许多标准. 在应用上,应根据问题的性质,确定哪一个或哪一些标准更为重要,然后依据它去选择适当的估计,不分情况而拘泥于一种固定的标准是不可取的.

3 区间估计

设总体分布有参数 θ，为估计 $g(\theta)$，构造两个统计量 $\hat{g}_1(\boldsymbol{X})$ 和 $\hat{g}_2(\boldsymbol{X})$，$\hat{g}_1(\boldsymbol{X}) \leqslant \hat{g}_2(\boldsymbol{X})$. 每当有了样本 $\boldsymbol{X}$ 时，就把 $g(\theta)$ 估计在区间 $[\hat{g}_1(\boldsymbol{X}), \hat{g}_2(\boldsymbol{X})]$ 内. $[\hat{g}_1(\boldsymbol{X}), \hat{g}_2(\boldsymbol{X}_2)]$ 称为 $g(\theta)$ 的一个**区间估计**.

关于区间估计的方法和理论，在 20 世纪 30 年代，费希尔和奈曼先后提出了信任推断法和置信区间理论. 此外，贝叶斯统计和沃尔德的统计决策理论也考虑了区间估计问题. 迄今，占主流地位的是奈曼的方法，故本章以介绍他的方法为主.

3.1 置信区间

3.1.1 置信系数和置信水平

区间估计 $[\hat{g}_1(\boldsymbol{X}), \hat{g}_2(\boldsymbol{X})]$ 正确与否，要看它是否包含被估计的 $g(\theta)$，而这一点取决于样本 $\boldsymbol{X}$，因而只能以一定概率成立

$$Q(\theta) = P_\theta(\hat{g}_1(\boldsymbol{X}) \leqslant g(\theta) \leqslant \hat{g}_2(\boldsymbol{X})).$$

$Q(\theta)$ 可以理解为当参数值为 θ 时，$[\hat{g}_1(\boldsymbol{X}), \hat{g}_2(\boldsymbol{X})]$ 这个区间估计正确的概率. 此概率一般依赖 θ. 如果

$$Q(\theta) \geqslant 1 - \alpha \qquad (\forall \theta \in \Theta),$$

其中 Θ 为参数空间，则称区间估计 $[\hat{g}_1(\boldsymbol{X}), \hat{g}_2(\boldsymbol{X})]$ 有**置信水平** $1-\alpha$.

$\alpha(\alpha > 0)$ 通常比较小，如 $\alpha = 0.05$ 或 0.01.

如果 $1-\alpha$ 是置信水平，则对于任何 $\beta > \alpha$，有 $Q(\theta) \geqslant 1-\alpha \geqslant 1-\beta$，故 $1-\beta$ 也是置信水平. 由此可知，置信水平不是唯一确定的. 为克服这一缺点，引进**置信系数**的概念：

$$\text{置信系数} = \text{最大的置信水平} = \inf_{\theta \in \Theta} Q(\theta),$$

即置信系数是指 $Q(\theta)$ 在 Θ 上的下确界.

置信系数一方面刻划了区间估计的“可靠度”，置信系数愈大，区间包含被估计的 $g(\theta)$ 的机会就愈大，即得出正确结果的机会愈大；另一方面，刻画了区间估计的“精度”，区间愈长，精度就愈差. 区间估计的这两方面的性质 —— 可靠度和精度，处在矛盾的地位. 奈曼处理这个问题的做法是：先保证置信系数达到指定的要求，在这个前提下使其精度尽可能大. 如何实现这一点呢？这涉及到复杂的理论问题，此处不作介绍. 下面只介绍若干构造区间估计使其置信系数达到指定值的方法，而不涉及其精度问题.

由于有了置信系数这个名称，在奈曼的理论中，常把区间估计称为置信区间.

3.1.2 置信限

$g(\theta)$ 的区间估计$[\hat{g}_1,\hat{g}_2]$同时界定了 $g(\theta)$ 的上、下限.在有些应用中,有时只关心 $g(\theta)$ 的上限或下限,它们可分别理解为形如$(-\infty,\bar{g}(X)]$(上限)或$[\underline{g}(X),\infty)$(下限)的区间估计.$\bar{g}$ 和$\underline{g}$ 分别称为 $g(\theta)$ 的**置信上、下限**,其置信系数分别由

$$\inf_{\theta\in\Theta}P_\theta(g(\theta)\leqslant\bar{g}(X)) \quad 和 \quad \inf_{\theta\in\Theta}P_\theta(g(\theta)\geqslant\underline{g}(X))$$

去定义.

3.1.3 置信区间和置信限的重要例子

构造置信区间或置信限的一个一般方法是:

设法寻找一个依赖于 $g(\theta)$ 和样本 X 的函数$h(g(\theta),X)$,其分布与 θ 无关,记其分布为 F.对于给定的置信系数 $1-\alpha$,寻找常数 a,b,使

$$P_\theta(a\leqslant h(g(\theta),X)\leqslant b)=F(b)-F(a)=1-\alpha.$$

如果不等式 $a\leqslant h(g(\theta),X)\leqslant b$ 可改写为$\hat{g}_1(X)\leqslant g(\theta)\leqslant\hat{g}_2(X)$ 的形式,则上式变成

$$P_\theta(\hat{g}_1(X)\leqslant g(\theta)\leqslant\hat{g}_2(X))=1-\alpha,$$

这即表明:$g(\theta)$ 的区间估计有置信系数 $1-\alpha$.

求置信上、下限的方法与此类似.

例1 设总体分布为正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$,σ^2 已知,求 μ 的区间估计(形式上,$\theta=(\mu,\sigma^2)$,$g(\theta)=g(\mu,\sigma^2)=\mu$).

设 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为i.i.d.样本,则$\sqrt{n}(\bar{X}-\mu)/\sigma$ 有标准正态分布Φ.以 u_α 记Φ 的上 α 分位点,即 $\Phi(u_\alpha)=1-\alpha$.由 Φ 关于0对称知,

$$P_\theta\left(\left|\frac{\sqrt{n}(\bar{X}-\mu)}{\sigma}\right|\leqslant u_{\alpha/2}\right)=1-\alpha,$$

即

$$P_\theta\left(\bar{X}-\frac{\sigma u_{\alpha/2}}{\sqrt{n}}\leqslant\mu\leqslant\bar{X}+\frac{\sigma u_{\alpha/2}}{\sqrt{n}}\right)=1-\alpha.$$

因此,$[\bar{X}-\sigma u_{\alpha/2}/\sqrt{n},\bar{X}+\sigma u_{\alpha/2}/\sqrt{n}]$ 是 μ 的一个$(1-\alpha)$ 区间估计("置信系数为 $1-\alpha$ 的区间估计"的略语).

类似地,得 $\bar{X}+\sigma u_\alpha/\sqrt{n}$ 和$\bar{X}-\sigma u_\alpha/\sqrt{n}$ 分别为μ 的$(1-\alpha)$ 置信上、下限.

常用的几个 u_α 值为:

$$u_{0.995}=2.575\,8,\quad u_{0.99}=2.326\,3,$$

$$u_{0.975}=1.960\,0,\quad u_{0.95}=1.644\,5,\quad u_{0.90}=1.281\,6.$$

其他可查本篇"常用统计数值表".

例2 问题同例1,但 μ,σ^2 都未知.

考虑量$\sqrt{n}(\overline{X}-\mu)/S$，$S^2=\sum_{i=1}^{n}(X_i-\overline{X})^2/(n-1)$为样本方差，按1.3.4小节2.的(2)，它服从自由度为$n-1$的t分布t_{n-1}，t_{n-1}是一个关于0对称的分布.故若记$t_{n-1}(\alpha)$为t_{n-1}的上α分位点，即$P(t_{n-1}\leqslant t_{n-1}(\alpha))=1-\alpha$，则有

$$P_\theta\left(\frac{\sqrt{n}\,|\overline{X}-\mu|}{S}\leqslant t_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\right)=1-\alpha.$$

此式可写成

$$P_\theta\left(\overline{X}-\frac{St_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{\sqrt{n}}\leqslant\mu\leqslant\overline{X}+\frac{St_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{\sqrt{n}}\right)=1-\alpha.$$

由此得$\left[\overline{X}-\frac{St_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{\sqrt{n}},\overline{X}+\frac{St_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{\sqrt{n}}\right]$是$\mu$的一个$(1-\alpha)$置信区间.

类似地，可得$\overline{X}+St_{n-1}(\alpha)/\sqrt{n}$和$\overline{X}-St_{n-1}(\alpha)/\sqrt{n}$分别是$\mu$的$(1-\alpha)$置信上、下限.

应用时，要根据给定的α和样本量n，查t分布表得$t_{n-1}(\alpha/2)$或$t_{n-1}(\alpha)$.

例3　同例1，μ,σ^2都未知，求σ^2的区间估计.

按1.3.4小节2.的(1)，$(n-1)S^2/\sigma^2$服从自由度为$n-1$的χ^2分布χ^2_{n-1}.故若以$\chi^2_{n-1}(\alpha)$记χ^2_{n-1}的上α分位点，即$P(\chi^2_{n-1}\leqslant\chi^2_{n-1}(\alpha))=1-\alpha$，则有

$$P_\theta\left(\chi^2_{n-1}\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\leqslant\frac{(n-1)S^2}{\sigma^2}\leqslant\chi^2_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\right)=1-\alpha.$$

上式可写成：

$$\frac{(n-1)S^2}{\chi^2_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)}\leqslant\sigma^2\leqslant\frac{(n-1)S^2}{\chi^2_{n-1}\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)}.$$

由此得$\left[\frac{(n-1)S^2}{\chi^2_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)},\frac{(n-1)S^2}{\chi^2_{n-1}\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)}\right]$是$\sigma^2$的一个$(1-\alpha)$置信区间，而$\left[\frac{\sqrt{n-1}S}{\sqrt{\chi^2_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)}},\frac{\sqrt{n-1}S}{\sqrt{\chi^2_{n-1}\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)}}\right]$是$\sigma$的一个$(1-\alpha)$置信区间.

类似地，可得$(n-1)S^2/\chi^2_{n-1}(1-\alpha)$和$(n-1)S^2/\chi^2_{n-1}(\alpha)$分别是$\sigma^2$的$(1-\alpha)$置信上、下限.

$\chi^2_{n-1}(\alpha/2)$和$\chi^2_{n-1}(\alpha)$的值要查χ^2分布表.

例4　设有两个正态总体$N(\mu_1,\sigma^2)$和$N(\mu_2,\sigma^2)$(注意其方差相同)，μ_1,μ_2,σ^2都未知，分别从其中抽出i.i.d.样本$X_1,X_2,\cdots,X_{n_1}$和$Y_1,Y_2,\cdots,Y_{n_2}$，求$\mu_2-\mu_1$的置信区间和置信限.

作变量

$$T = \frac{\sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2}}((\overline{Y} - \overline{X}) - (\mu_2 - \mu_1))}{\sqrt{\frac{1}{n_1 + n_2 - 2}((n_1 - 1)S_1^2 + (n_2 - 1)S_2^2)}},$$

其中 S_1^2 和 S_2^2 分别是 $X_1, X_2, \cdots, X_{n_1}$ 和 $Y_1, Y_2, \cdots, Y_{n_2}$ 的样本方差,按1.3.4小节2.中(4),T 服从自由度为 $n_1 + n_2 - 2$ 的 t 分布.与例2一样地推理,可得 $\mu_2 - \mu_1$ 的一个 $(1 - \alpha)$ 置信区间为

$$\left[(\overline{Y} - \overline{X}) - t_{n_1+n_2-2}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{\frac{n_1 + n_2}{n_1 n_2}}S, (\overline{Y} - \overline{X}) + t_{n_1+n_2-2}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{\frac{n_1 + n_2}{n_1 n_2}}S\right],$$

其中 $S = [((n_1 - 1)S_1^2 + (n_2 - 1)S_2^2)/(n_1 + n_2 - 2)]^{1/2}$.类似地,可得 $\mu_2 - \mu_1$ 的 $(1 - \alpha)$ 置信上、下限分别是

$$(\overline{Y} - \overline{X}) + t_{n_1+n_2-2}(\alpha)\sqrt{\frac{n_1 + n_2}{n_1 n_2}}S$$

和

$$(\overline{Y} - \overline{X}) - t_{n_1+n_2-2}(\alpha)\sqrt{\frac{n_1 + n_2}{n_1 n_2}}S.$$

例5　同上例,但假定两个总体的方差 σ_1^2 和 σ_2^2 不同且都未知,求方差比 σ_2^2/σ_1^2 的置信区间与置信限.

作变量

$$T = \frac{S_2^2}{\sigma_2^2} \frac{\sigma_1^2}{S_1^2} = \frac{S_2^2}{S_1^2} \frac{\sigma_1^2}{\sigma_2^2},$$

其中 S_1^2、S_2^2 的含义同例4.按1.3.4小节2.中(3),T 服从自由度为 $(n_2 - 1, n_1 - 1)$ 的 F 分布.与前面各例同一地推理,可得 σ_2^2/σ_1^2 的一个 $(1 - \alpha)$ 置信区间为

$$\left[\left(\frac{S_2^2}{S_1^2 F_{n_2-1,n_1-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)}\right)^{-1}, \left(\frac{S_2^2}{S_1^2 F_{n_2-1,n_1-1}\left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)}\right)^{-1}\right],$$

其中 $F_{n_2-1,n_1-1}(\beta)$,是自由度 $(n_2 - 1, n_1 - 1)$ 的 F 分布的上 β 分位点,其值可在 F 分布表中查得.

例6　$X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为从具有指数密度 $\theta^{-1}e^{-x/\theta}$ 的总体中抽出的i.i.d.样本,求 θ 的置信区间和置信限.

此问题的解法要利用下面这个不难证明的事实:$n\overline{X}/\theta$ 服从自由度为 $2n$ 的 χ^2 分布 χ_{2n}^2.于是,仿照以前各例,得到 θ 的一个 $(1 - \alpha)$ 置信区间为

$$[n\overline{X}/(\chi_{2n}^2(\alpha/2)), n\overline{X}/(\chi_{2n}^2(1 - \alpha/2))],$$

而 θ 的 $(1 - \alpha)$ 置信上、下限分别是

$$n\overline{X}/(\chi_{2n}^2(1 - \alpha)) \text{ 和 } n\overline{X}/(\chi_{2n}^2(\alpha)).$$

指数分布常作为元件寿命分布.在这个模型下,本例的问题可解释为:拿 n 个元件独立做试验,直到全部失效为止,以 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 分别记这 n 个元件的寿命,要求据此构造 θ 的区间估计.当 n 较大时,这 n 个元件中难免会有少数寿命很长,

从而使整个试验需要很长时间.为克服这一不便,实际工作中常用截尾试验法.一种截尾方式是定数截尾,即先指定一适当的自然数 $r < n$, n 个元件同时试验,其中有 r 个失效后即停止试验.以 $X_1 \leqslant X_2 \leqslant \cdots \leqslant X_r$ 分别记这 r 个失效元件的寿命,则可以证明:

若记 $T = X_1 + X_2 + \cdots + X_{r-1} + (n - r + 1)X_r$,则 T/θ 服从自由度为 $2r$ 的 χ^2 分布.由此可求得 θ 的置信区间与置信限.

例 7 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为抽自均匀分布 $R(0,\theta)$ 的 i.i.d.样本,求 θ 的置信区间和置信限.

记 $T = \max\limits_{1\leqslant i\leqslant n} X_i$,易见,$T/\theta$ 有概率密度 $nt^{n-1}(0 < t < 1)$,在 $0 < t < 1$ 外的为 0.据此,可以用以上几例的做法决定 θ 的置信区间与置信限.但本例因分布简单,可采用略不同的一种做法:设找出 $a, b, 0 < a < b < 1$,使

$$\int_a^b nt^{n-1}\mathrm{d}t = b^n - a^n = 1 - \alpha,$$

则

$$P_\theta\left(a \leqslant \frac{T}{\theta} \leqslant b\right) = 1 - \alpha,$$

而 $[b^{-1}T, a^{-1}T]$ 是 θ 的一个 $(1-\alpha)$ 置信区间,其长为 $(a^{-1} - b^{-1})T$.故应找出 a, b,使 $a^{-1} - b^{-1}$ 最小.显然在 $a = \alpha^{1/n}, b = 1$ 时 $a^{-1} - b^{-1}$ 为最小,故得到 θ 的一个 $(1 - \alpha)$ 置信区间为 $[T, \alpha^{-1/n}T]$.由于总有 $\theta \geqslant T$, $T \leqslant \theta \leqslant \alpha^{-1/n}T$ 等价于 $\theta \leqslant \alpha^{-1/n}T$,故 $\alpha^{-1/n}T$ 就是 θ 的一个 $(1 - \alpha)$ 置信上限.另由

$$P_\theta(T/\theta \leqslant (1 - \alpha)^{1/n}) = 1 - \alpha,$$

可推出 θ 的一个 $(1 - \alpha)$ 置信下限为 $(1 - \alpha)^{-1/n}T$.

3.1.4 大样本置信区间

从前面诸例可看出,区间估计依赖于知道某一变量 $h(g(\theta), X)$ 的确切分布,但这往往做不到.有时,可以知道其渐近分布,因此在样本量足够大时,可据以求出 $g(\theta)$ 的区间估计,这称为大样本区间估计.

例 8 设总体有期望 θ,方差 σ^2, $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为抽自其中的 i.i.d.样本,求 θ 的区间估计.

按中心极限定理,当 n 很大时,$\sqrt{n}(\overline{X} - \theta)/\sigma$ 的分布接近 $N(0,1)$ 的分布.当用标准差 S 取代 σ 时,这结果仍成立.于是近似地有

$$P\left(\left|\frac{\sqrt{n}(\overline{X} - \theta)}{S}\right| \leqslant u_{\alpha/2}\right) \approx 1 - \alpha,$$

$[\overline{X} - Su_{\alpha/2}/\sqrt{n}, \overline{X} + Su_{\alpha/2}/\sqrt{n}]$ 为置信区间,其置信系数近似地为 $1 - \alpha$.对置信限也可类似处理.

这种方法的缺点在于:对于一个并不非常大的样本量 n(应用上常见这种情况),并不能确定 $\sqrt{n}(\overline{X} - \theta)/S$ 的分布与 $N(0,1)$ 的分布接近到何种程度,因而也不知道区间估计的置信系数与名义上的 $1 - \alpha$ 究竟有多少差距.所有大样本方法都有

这个问题.大样本方法在统计中的广泛使用,相当程度实出于不得已.当然,所谓小样本方法,即基于确切分布的方法,其正确性也是有条件的,它依赖于对模型的假定是否正确.如例2,若总体分布与正态有较大的偏离,则所定的置信区间,其真实的置信系数也会与名义上的 $1-\alpha$ 有较大的偏离.

例 9 设总体有两点分布:$P_\theta(X=1)=1-P_\theta(X=0)=\theta, 0\leqslant\theta\leqslant 1, X_1, X_2,\cdots,X_n$ 为抽自其中的 i.i.d.样本,求 θ 的置信区间与置信限.

对于离散型总体,适合 3.1.3 节中的条件的情况更少,且一般不一定能得到确切的具有所指定的置信系数 $1-\alpha$ 的置信区间(除非用所谓随机化方法,此处不讨论).但大样本方法的使用则没有两样.就此例来说,按中心极限定理有$\sqrt{n}(\bar{X}-\theta)/\sqrt{\theta(1-\theta)}$ 近似地服从 $N(0,1)$ 分布(n 足够大时),故近似地有

$$P_\theta\left(\frac{\sqrt{n}\left|\bar{X}-\theta\right|}{\sqrt{\theta(1-\theta)}}\leqslant u_{\alpha/2}\right)\approx 1-\alpha.$$

由不等式$\sqrt{n}\,|\bar{X}-\theta|/\sqrt{\theta(1-\theta)}\leqslant u_{\alpha/2}$ 可解出为 $A(\bar{X})\leqslant\theta\leqslant B(\bar{X})$ 的形式,其中

$$A(\bar{X})=\frac{n}{n+u_{\alpha/2}^2}\left(\bar{X}+\frac{u_{\alpha/2}^2}{2n}\right)-u_{\alpha/2}\left(\frac{\bar{X}(1-\bar{X})}{n}+\frac{u_{\alpha/2}^2}{4n^2}\right)^{1/2},$$

$$B(\bar{X})=\frac{n}{n+u_{\alpha/2}^2}\left(\bar{X}+\frac{u_{\alpha/2}^2}{2n}\right)+u_{\alpha/2}\left(\frac{\bar{X}(1-\bar{X})}{n}+\frac{u_{\alpha/2}^2}{4n^2}\right)^{1/2}.$$

故得 θ 的置信区间为$[A(\bar{X}),B(\bar{X})]$,当 n 很大时,其置信系数接近 $1-\alpha$.θ 的(近似的)$(1-\alpha)$ 置信上、下限分别为 $B(\bar{X})$ 和 $A(\bar{X})$,但式中的 $\alpha/2$ 要改为 α.

当 $n\geqslant 30$ 而 θ 不太接近 0 或 1 时(这要对 θ 有些先验知识),此法适用性是可以的.

3.1.5 置信区域

以上讨论的是 $g(\theta)$ 为一维的情形.若 $g(\theta)=(g_1(\theta),g_2(\theta),\cdots,g_k(\theta))$ 为 k 维,$k\geqslant 1$,则需用 $\mathbf{R}^k$ 中的一个区域去估计它.与样本 $\boldsymbol{X}$ 有关的、$\mathbf{R}^k$ 中的区域$\hat{g}(\boldsymbol{X})$,称为 $g(\theta)$ 的一个区域估计,其置信系数定义为 $\inf\limits_{\theta\in\Theta}P_\theta(g(\theta)\in\hat{g}(\boldsymbol{X}))$.

置信区域多用在多元分析和回归分析中,可参看本书有关的篇章.对于一般情况,可以分别对每个 $g_j(\theta)$ 作区间估计$[\hat{g}_{j1}(\boldsymbol{X}),\hat{g}_{j2}(\boldsymbol{X})]$,其置信系数记为 $1-\alpha_j, j=1,\cdots,k$.若 k 个二维随机向量$(\hat{g}_{j1}(\boldsymbol{X}),\hat{g}_{j2}(\boldsymbol{X}))$ 相互独立,$j=1,2,\cdots,k$,则

$$\begin{aligned}&P_\theta(\hat{g}_{j1}(\boldsymbol{X})\leqslant g_j(\theta)\leqslant\hat{g}_{j2}(\boldsymbol{X}),j=1,2,\cdots,k)\\&=\prod_{j=1}^{k}P_\theta(\hat{g}_{j1}(\boldsymbol{X})\leqslant g_j(\theta)\leqslant\hat{g}_{j2}(\boldsymbol{X}))\\&=(1-\alpha_1)(1-\alpha_2)\cdots(1-\alpha_k).\end{aligned}$$

可以选取 $\alpha_1=\alpha_2=\cdots=\alpha_k=\alpha_0$，使 $(1-\alpha_0)^k=1-\alpha$，则 $\mathbf{R}^k$ 中的长方体 $[\hat{g}_{11}(X),\hat{g}_{12}(X)]\times\cdots\times[\hat{g}_{k1}(X),\hat{g}_{k2}(X)]$ 是 $g(\theta)$ 的一个置信区域，有置信系数 $1-\alpha$.

这个做法基本上只适用于下述情况：有 k 个总体，总体参数依次为 $\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_k$，当要求 $g(\theta)=(g_1(\theta_1),g_2(\theta_2),\cdots,g_k(\theta_k))$ 的置信区域时，自每个总体抽样，用第 j 个总体中抽出的样本估计 $g_j(\theta_j)$. 下面是一个略有变通的例子.

例 10　设 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为抽自正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$ 的 i.i.d. 样本，求 $g(\theta)=(\mu,\sigma)$ 的区域估计.

因 $\overline{X}$ 与 S^2 独立，且

$$\frac{\sqrt{n}(\overline{X}-\mu)}{\sigma}\sim N(0,1)\quad 及\quad \frac{(n-1)S^2}{\sigma^2}\sim\chi^2_{n-1}.$$

记 $\beta=1-(1-\alpha)^{1/2}$，有

$$P_\theta\left(\left|\frac{\sqrt{n}(\overline{X}-\mu)}{\sigma}\right|\leqslant u_{\alpha/2},\chi^2_{n-1}\left(1-\frac{\beta}{2}\right)\leqslant\frac{(n-1)S^2}{\sigma^2}\leqslant\chi^2_{n-1}(\beta-2)\right)$$

$$=P_\theta(|\sqrt{n}(\overline{X}-\mu)|\leqslant\sigma u_{\alpha/2})P_\theta\left(\frac{\sqrt{n-1}S}{(\chi^2_{n-1}(\beta/2))^{1/2}}\leqslant\sigma\leqslant\frac{\sqrt{n-1}S}{(\chi^2_{n-1}(1-\frac{\beta}{2}))^{1/2}}\right)$$

$$=(1-\beta)(1-\beta)=(1-\beta)^2=1-\alpha.$$

上式可写成

$$P_\theta((\mu,\sigma)\in\mathscr{S}(X))=1-\alpha,$$

显然 $\mathscr{S}(X)$ 是 (μ,σ) 的一个 $(1-\alpha)$ 置信区域. $\mathscr{S}(X)$ 是图 3-1 所示的四边形 $ABCD$，它由 (μ,σ) 平面上 4 条直线 $l_1\sim l_4$ 围成，其中，

$$l_1:\sigma=\frac{\sqrt{n-1}S}{(\chi^2_{n-1}(\frac{\beta}{2}))^{1/2}};$$

$$l_2:\sigma=\frac{\sqrt{n-1}S}{(\chi^2_{n-1}(1-\frac{\beta}{2}))^{1/2}};$$

$$l_3:\mu=-\frac{\sigma u_{\alpha/2}}{\sqrt{n}}+\overline{X};$$

$$l_4:\mu=\sigma u_{\alpha/2}/\sqrt{n}+\overline{X}.$$

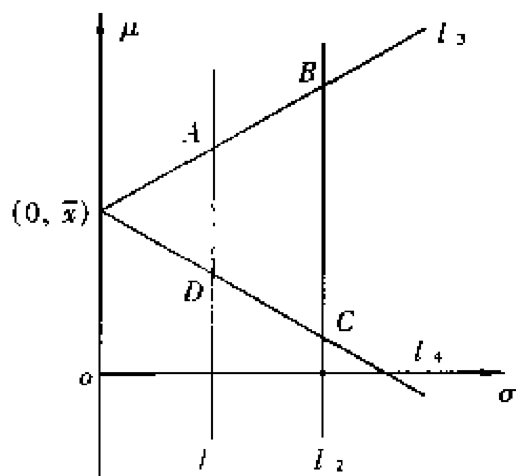


图 3-1

对于一般情况，若对每个 $g_j(\theta)$ 构造 $(1-\alpha/k)$ 置信区间 $[\hat{g}_{j1}(X),\hat{g}_{j2}(X)]$，$j=1,2,\cdots,k$，则有

$$P_\theta\left(\hat{g}_{j1}(X)\leqslant g_j(\theta)\leqslant\hat{g}_{j2}(X),1\leqslant j\leqslant k\right)$$

$$\geqslant \sum_{j=1}^{k} P_\theta\left(\widehat{g}_{j1}(\boldsymbol{X}) \leqslant g_j(\theta) \leqslant \widehat{g}_{j2}(\boldsymbol{X})\right) - (k-1)$$
$$\geqslant k(1-\alpha/k) - (k-1) = 1-\alpha.$$

因此,长方体$[\widehat{g}_{11}(\boldsymbol{X}),\widehat{g}_{12}(\boldsymbol{X})] \times \cdots \times [\widehat{g}_{k1}(\boldsymbol{X}),\widehat{g}_{k2}(\boldsymbol{X})]$可作为$g(\theta) = (g_1(\theta), g_2(\theta),\cdots,g_k(\theta))$的置信域,其置信系数不小于$1-\alpha$.当然,它有可能大于$1-\alpha$,从而使置信域不必要地变大了.

对例10来说,利用这个办法可得到(μ,σ)的矩形置信域:

$$\overline{X} - \frac{St_{n-1}(\frac{\beta}{2})}{\sqrt{n}} \leqslant \mu \leqslant \overline{X} + \frac{St_{n-1}(\frac{\beta}{2})}{\sqrt{n}},$$
$$\frac{\sqrt{n-1}S}{(\chi^2_{n-1}(\frac{\beta}{2}))^{1/2}} \leqslant \sigma \leqslant \frac{\sqrt{n-1}S}{(\chi^2_{n-1}(1-\frac{\beta}{2}))^{1/2}},$$

其中$\beta = 1-(1-\alpha)^{1/2}$,其置信系数介于$1-\alpha$和$1-\alpha/2$之间.

3.2　信任估计

信任估计法是费希尔在1930年提出的一种区间估计方法.在费希尔对数理统计学的众多贡献中,这一项是争议最大的,费希尔关于信任估计的思想可以通过一个简单例子来说明.

设$X_1,X_2,\cdots,X_n$为抽自正态总体$N(\theta,\sigma^2)$的i.i.d.样本,σ^2已知,θ未知,求θ的区间估计.对此,费希尔的推理如下:

记

$$\xi = \frac{\sqrt{n}(\overline{X}-\theta)}{\sigma},$$

则ξ有分布$N(0,1)$,解上式得

$$\theta = -\frac{\sigma\xi}{\sqrt{n}} + \overline{X},$$

其中$\sigma,\sqrt{n}$为已知常数;$\overline{X}$由样本算出,也是已知的;ξ的分布已知.故(在有了样本后)θ的分布可以求出.在此例中θ为正态分布$N(\overline{X},\sigma^2/n)$.费希尔把$\theta$的分布叫做$\theta$的**信任分布**.如以$F$记这个分布,找出$\theta_1,\theta_2$,使

$$F(\theta_2) - F(\theta_1) = 1-\alpha,$$

则事件$\theta_1 \leqslant \theta \leqslant \theta_2$的"信任概率"为$1-\alpha$.费希尔把$[\theta_1,\theta_2]$作为$\theta$的区间估计,并称之为$\theta$的**信任区间**,其"**信任系数**"为$1-\alpha$.本例可取

$$\theta_1 = \overline{X} - \sigma u_{\alpha/2}/\sqrt{n},\quad \theta_2 = \overline{X} + \sigma u_{\alpha/2}/\sqrt{n}.$$

只有这个取法使$\theta_2-\theta_1$最小,得到与本章例1相同的结果.

若σ未知,则可以用S取代σ,并利用$\xi = \sqrt{n}(\overline{X}-\theta)/S \sim t_{n-1}$的事实,一样可以得出$\theta$的信任区间,结果与例2相同.

费希尔这个做法的新奇之处，是把 θ 当作随机变量看，有其概率分布，而一般的看法是：θ 是一个虽然未知，但是固定的常数．这是一个观念上的分歧．这一点倒不能看做是费希尔方法的致命弱点，因为一种方法或理论，只要没有内在的矛盾，就可当作一家之言提出来，而不必一定与现存理论合拍．但是，费希尔未能对信任分布给出一个明确的定义和确定它的方法，而只停留在对个别例子用特定的方法去处理，如何对信任分布运算也缺乏明确的规则．这些原因使他的方法未能得到广泛的接受．后来也有些学者继续在这方向上做工作，以图解决这些问题，但未能取得实质的进展．

在简单的情况下，利用信任估计法求出的若干区间估计，都与用奈曼的置信区间方法求出的相同，但在较复杂的例子中这二者确有不同．最著名且有实用价值的例子，是所谓贝伦斯－费希尔（Behrens-Fisher）问题．下面简单介绍一下这个问题．

设 $X_1,X_2,\cdots,X_{n_1}$ 和 $Y_1,Y_2,\cdots,Y_{n_2}$ 分别是抽自正态总体 $N(\mu_1,\sigma_1^2)$ 和 $N(\mu_2,\sigma_2^2)$ 的 i.i.d. 样本，μ_1,σ_1^2,μ_2 和 σ_2^2 都未知，$\sigma_1^2\neq\sigma_2^2$，求 $\mu_2-\mu_1$ 的区间估计．这即是贝伦斯－费希尔问题．

当 $\sigma_1^2=\sigma_2^2$ 时，可用 t 分布求解，见例 4．但在 $\sigma_1^2\neq\sigma_2^2$ 的情况下，此问题没有适当的小样本解．如果 n_1、n_2 都很大，可考虑用大样本方法，用正态逼近

$$\frac{((\overline{Y}-\overline{X})-(\mu_2-\mu_1))}{(S_1^2/n_1+S_2^2/n_2)^{1/2}}\sim N(0,1)$$

去求解．此处 S_1^2,S_2^2 分别是 X 样本和 Y 样本的样本方差．

费希尔用信任估计方法处理这个问题．其做法如下：

记

$$\xi=\frac{\sqrt{n_1}(\overline{X}-\mu_1)}{S_1},$$

$$\eta=\frac{\sqrt{n_2}(\overline{Y}-\mu_2)}{S_2},$$

则 ξ 与 η 独立，分别服从自由度为 n_1-1 和 n_2-1 的 t 分布．于是，有

$$(\mu_2-\mu_1)-(\overline{Y}-\overline{X})=\frac{S_1\xi}{\sqrt{n_1}}-\frac{S_2\eta}{\sqrt{n_2}}. \tag{3-1}$$

有了样本后，$\overline{X},\overline{Y},S_1,S_2$ 都已知．按费希尔的观点，上式给出了 $\mu_2-\mu_1$ 的信任分布，可找出 $d>0$，使

$$P\left(\left|\frac{S_1\xi}{\sqrt{n_1}}-\frac{S_2\eta}{\sqrt{n_2}}\right|\leqslant d\right)=1-\alpha. \tag{3-2}$$

在计算这个概率时，把 S_1,S_2 作为已知常数（无随机性），$\xi\sim t_{n_1-1}$，$\eta\sim t_{n_2-1}$，而 ξ、η 独立，所定出的 d 与 S_1,S_2 有关，因此与样本有关．由式(3-1)和式(3-2)可得出，$\mu_2-\mu_1$ 的信任区间为 $[(\overline{Y}-\overline{X})-d,(\overline{Y}-\overline{X})+d]$，其信任系数为 $1-\alpha$．为得到满足式(3-2)的 d，费希尔及其合作者耶茨（F. Yates）编制有专门的表（见他们的著作 Statistical Tables）．

奈曼曾就 $\alpha = 0.05, n_1 = 12, n_2 = 6$ 及 $\sigma_1/\sigma_2 = 0.1, 1$ 和 10 等情况，计算了这个区间估计在奈曼意义下的置信系数，其结果分别为 0.966,0.960 和 0.934. 这说明，奈曼的信任区间估计与奈曼的置信区间估计的确不是一回事，不过，所算出的值与名义值0.95 差别都很小.这说明，即使坚持奈曼的理论，信任估计方法仍不失为一个足够好的近似.

3.3 容忍区间与容忍限

容忍区间与容忍限其实与参数的区间估计没有多大关系，因其解也是以区间的形式给出的，故放在此介绍.

先看一个例子.设有一种产品，其某质量指标按标准应为 a，容许有一定的误差.制造时，当然是努力使质量指标值达到 a.但由于种种随机性的原因，指标值 X 不可能总是为a，而会形成一个分布，其大部分概率集中在 a 近旁，但也可能有少量产品的指标值与 a 有较大偏离.如果要列举出一个区间$[A, B]$，使所有产品的指标都在其内，则这个区间可能很长.但是，如果把要求放松一些，找一区间$[A_1, B_1]$，使全部产品的95%（比方说）其质量指标都在其内，则区间$[A_1, B_1]$可以短得多，因为绝大部分产品其质量指标都在 a 附近.这个区间$[A_1, B_1]$就称为质量指标 X 的分布的**容忍区间**.

一般地，设总体分布 F 未知，$\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 是其 i.i.d.样本.如要利用样本 $\boldsymbol{X}$ 作出一个区间$[A(\boldsymbol{X}), B(\boldsymbol{X})]$，使其至少能包含总体全部概率的 $100 \times (1-\beta)\%$，即

$$F(B(\boldsymbol{X})) - F(A(\boldsymbol{X})) \geqslant 1 - \beta. \tag{3-3}$$

这是没有完全把握的，因 $A(\boldsymbol{X}), B(\boldsymbol{X})$ 依赖于样本，不可能有百分之百的把握说式(3-3) 成立.对此，只能以一定的概率保证它，比如，要求这概率不小于 $1-\gamma$，即

$$P(F(B(\boldsymbol{X})) - F(A(\boldsymbol{X})) \geqslant 1 - \beta) \geqslant 1 - \gamma. \tag{3-4}$$

满足式(3-4)的一个区间$[A(\boldsymbol{X}), B(\boldsymbol{X})]$，称为总体分布 F 的一个(β, γ)容忍区间. $\beta > 0, \gamma > 0$，一般都比较小.注意这两个数所起的作用是不同的.当然，在满足式(3-4) 的前提下，还是希望使区间的长度 $B(\boldsymbol{X}) - A(\boldsymbol{X})$ 能尽量小一些.

如果 $A(\boldsymbol{X}) = -\infty$，则式(3-4) 成为

$$P(F(B(\boldsymbol{X})) \geqslant 1 - \beta) \geqslant 1 - \gamma.$$

这样的 $B(\boldsymbol{X})$ 称为总体分布的(β, γ) **容忍上限**.如果 $B(\boldsymbol{X}) = \infty$（因而 $F(B(\boldsymbol{X})) = 1$），这时式(3-4) 成为

$$P(F(A(\boldsymbol{X})) \leqslant \beta) \geqslant 1 - \gamma.$$

这样的 $A(\boldsymbol{X})$ 称为总体分布的(β, γ) **容忍下限**.

与参数估计问题不同，本问题中没有一个明确定义的估计对象.为了帮助理解，直观上不妨作如下的想像：总体分布 F_θ 依赖参数θ，存在着一个最短的区间$[a(\theta), b(\theta)]$，使 $F_\theta(b(\theta)) - F_\theta(a(\theta)) = 1 - \beta$.而容忍区间$[A(\boldsymbol{X}), B(\boldsymbol{X})]$就是瞄准这个区间的估计（这不是确切的表述，只是为了帮助理解）.

例 11 正态总体为 $N(\mu, \sigma)$，μ, σ^2 都未知，$X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为 i.i.d.样本，求$(\beta,$

γ) 容忍区间.

包含总体 $100\times(1-\beta)\%$ 概率的最短区间,是$[a(\theta),b(\theta)]=[\mu-\sigma u_{\alpha/2},\mu+\sigma u_{\alpha/2}]$.用 $\overline{X}$ 和 S 估计 μ 和 σ,可以设想:(β,γ) 容忍区间大致有$[\overline{X}-Su_{\alpha/2},\overline{X}+Su_{\alpha/2}]$的形式.可是,作为 μ 和 σ 的估计,$\overline{X}$ 和 S 都有偏高或偏低的误差.因此,用$[\overline{X}-Su_{\alpha/2},\overline{X}+Su_{\alpha/2}]$估计$[\mu-\sigma u_{\alpha/2},\mu+\sigma u_{\alpha/2}]$,可以偏大或偏小.如果粗略地把二者的机会大体上看成差不多,则有大约 50% 的机会,使区间$[\overline{X}-Su_{\alpha/2},\overline{X}+Su_{\alpha/2}]$包含总体的概率不到 $1-\beta$.因为 γ 一般很小,$1-\gamma>0.5$.这说明,上述区间还不够大.补救的办法是取一个略大于 $u_{\alpha/2}$ 的 λ,而用

$$[\overline{X}-\lambda S,\overline{X}+\lambda S]$$

作为容忍区间.λ 的值依据样本量 n 以及 β,γ 定出,其分析的过程不在此写出,有统计表可查.

4　假 设 检 验

4.1　基 本 概 念

4.1.1　假设检验问题

设有一批产品,其废品率 θ 未知.统计上可以把这批产品想像为一个两点分布的总体:

$$P_\theta(\{1\})=\theta,\quad P_\theta(\{0\})=1-\theta\qquad(0\leqslant\theta\leqslant1).\tag{4-1}$$

其中,1 标志废品;0 标志合格品.当产品卖给一家商店时,商店要求废品率不超过某个界限 θ_0:$\theta\leqslant\theta_0$."$\theta\leqslant\theta_0$"就构成了对总体分布的一个要求或者说一个命题,其正确与否有待通过从总体中抽取样本来判断.

再看一个例子.一种元件的某项性能指标额定为 μ_0,假定有理由认为,该项性能指标对于批量生产的元件服从正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$.现在想知道均值 μ 是否等于额定值 μ_0.这里,"$\mu=\mu_0$"便构成了对总体分布的一个命题.它是否成立有待通过抽样(抽取若干元件并测定其性能指标)来判断.

一般地,设总体分布 F 未知,只知道它属于某分布族 $\mathscr{F}$.$\mathscr{F}$可分成两个不交的部分 $\mathscr{F}_0$ 和 $\mathscr{F}_1$.现在想知道 F 是否在 $\mathscr{F}_0$ 内.命题"$F\in\mathscr{F}_0$"即被称为一个统计假设,简称假设,也常称为"原假设".与此相对,"$F\in\mathscr{F}_1$",或写为"$F\notin\mathscr{F}_0$",称为**"对立假设"**或**"备择假设"**."备择"的意思是:如果原假设 $F\in\mathscr{F}_0$ 不能成立,还有 $\mathscr{F}_1$ 内的分布以备选择.有时也简单地把 $\mathscr{F}_0$ 和 $\mathscr{F}_1$ 本身称为原假设和对立假设,写为

$$F\in\mathscr{F}_0:F\in\mathscr{F}_1,\quad 或\quad \mathscr{F}_0:\mathscr{F}_1.\tag{4-2}$$

有时也把":"写成"$\leftrightarrow$",表示两边互相排斥的意思.

若总体分布为参数族$\{F_\theta:\theta\in\Theta\}$,则关于分布的假设转化为关于参数 θ 的假

设,即设参数空间 Θ 可分成两个不交部分 Θ_0 和 Θ_1. 于是,式(4-2) 可写成:

$$\theta \in \Theta_0 : \theta \in \Theta_1, \quad 或 \quad \Theta_0 : \Theta_1. \tag{4-3}$$

注意,总是把原假设写在左边. 对于前面举的两例,Θ_0 分别为 $\{\theta: 0 \leqslant \theta \leqslant \theta_0\}$ 和 $\{(\mu, \sigma^2): \mu = \mu_0\}$.

如果 Θ_0 只含一个元素,则称这种假设为简单假设;否则,称为复合假设. 前面两例中,第一例的 Θ_0 是复合假设. 第二例则要看 σ^2 是否已知:σ^2 已知时,Θ_0 为简单假设;未知时,为复合假设. 在这个例子中,"指标服从正态分布" 不是一个有待判断的假设,而是根据种种理由及经验认定是正确的命题. 这种命题称为"假定"(supposition, assumption), 以便与有待判断的像"$\mu = \mu_0$" 这类"假设"(hypothesis) 相区别. 当然,在某种情况下,对类似这种"正态性" 是否成立也可能拿不准,这时,也可以把"该性能指标服从正态分布" 这一点作为一个有待判断的假设.

4.1.2 检验,否定(拒绝)域,接受域

仍以第一个例子为例. 为检验原假设 $\theta \leqslant \theta_0$ 是否成立,从总体中抽取 n 个样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$. 因为 $\overline{X}$ 是 θ 的一个合适的估计,凭经验可感觉到,若 $\overline{X}$,或者说 $\sum_{i=1}^{n} X_i$,较小,原假设好像成立,否则就不成立. 这样可立定一个界限 c,把样本空间分成两部分:

$$A_0 = \{(X_1, X_2, \cdots, X_n): X_i = 0, 1, i = 1, 2, \cdots, n; \overline{X} \leqslant c\},$$

$$A_1 = \{(X_1, X_2, \cdots, X_n): X_i = 0, 1, i = 1, 2, \cdots, n; \overline{X} > c\}.$$

如果所抽得的样本落在集 A_0 内,就接受原假设 $\theta \leqslant \theta_0$;如果落在 A_1 内,则拒绝或否定之. 上述这个程序(选定统计量 $\overline{X}$,确定适当的界限 c) 称为对原假设的一个"**检验**",$\overline{X}$ 称为"检验统计量",c 称为"**临界值**",A_0 称为(该检验的)"**接受域**",而 A_1 称为"**否定域**" 或称"**拒绝域**".

制定一个检验,关键在于选定适当的检验统计量. 在参数分布族的情况下(式(4-3) 的形式),应找出 θ 的一个适当的估计量 $\hat{\theta}$,然后把 $\hat{\theta}$ 之值与"$\theta \in \Theta_0$" 去进行比较. 但检验统计量不一定就是 $\hat{\theta}$ 本身,有时还须加以若干修正,见后面的例子.

一般地,总是要设法找到某种衡量与原假设偏离程度的量 $T(X)$. 当 $T(X)$ 大到超过某临界值时,就否定原假设.

4.1.3 两类错误,功效函数,检验的水平

检验一个假设时,可以得出正确的结论,也可能犯以下两类错误之一:一是原假设本正确,但被否定了,这称为第一类错误;一是原假设本不对,但被接受了,这称为第二类错误. 对一个选定的检验来说,是否犯这类或那类错误,与抽得的样本有关.

设某检验 T 有否定域 S. 当参数值为 θ 时,使用此检验 T 而得出否定原假设 Θ_0

的概率为

$$\beta_T(\theta) = P_\theta(X \in S) \qquad (\theta \in \Theta),$$

其中 X 是样本;定义在参数空间 Θ 上的函数 $\beta_T(\theta)$ 称为检验 T 的**功效函数**,其在 Θ_1 上之值称为**功效**.

例 1　考虑前面检验废品率的例子.以 $\{\bar{X} > c\}$ 为否定域的检验,其功效函数可计算如下:

$\{\bar{X} > c\}$ 就是 $\left\{\sum_{i=1}^{n} X_i > nc\right\}$,不妨设 nc 为整数.因 $\sum_{i=1}^{n} X_i$ 服从二项分布 $B(n,\theta)$,故有

$$\beta_T(\theta) = P_\theta\left(\sum_{i=1}^{n} X_i > nc\right) = \sum_{i=nc+1}^{n} \binom{n}{i} \theta^i (1-\theta)^{n-i}.$$

由功效函数的含义知:

$$犯第一类错误的概率 = \beta_T(\theta) \qquad (\theta \in \Theta_0),$$

当 $\theta \in \Theta_1$ 时,不会犯第一类错误.

$$犯第二类错误的概率 = 1 - \beta_T(\theta) \qquad (\theta \in \Theta_1),$$

当 $\theta \in \Theta_0$ 时,不会犯第二类错误.

由此可以看出,一个良好的检验(以少犯错误为标准)的条件是,其功效函数 $\beta_T(\theta)$,在 Θ_0 上要小,在 Θ_1 上要大.这二者一般不可兼得.统计学上处理这个问题的办法是先保证前者,即指定一个一般是比较小的数 α,$\alpha > 0$,要求检验 T 满足

$$\beta_T(\theta) \leqslant \alpha \qquad (\forall \theta \in \Theta_0). \tag{4-4}$$

α 称为检验 T 的**水平**.或者说,T 为**水平 α 检验**.一般地,只要可能,就应取尽可能小的满足式(4-4)的 α 作为水平(也有的著作把 $\sup_{\theta \in \Theta_0} \beta_T(\theta)$ 定义为 T 的水平).给定水平后,在式(4-4)的约束下,再设法使 $\beta_T(\theta)$ 在 $\theta \in \Theta_1$ 时尽可能大.

这样就把假设检验问题的解归结为一个带约束的数学最优化问题.这一点是奈曼和皮尔逊在 20 世纪 20 和 30 年代一系列的论文中提出和发展的.在 4.2 节中,将介绍奈曼-皮尔逊理论中几点最初步的东西.这里需要指出的是:除了若干最简单的情况外,上述最优化问题一般难于解决.寻找检验的基本方法还不是这个理论,而是基于直观的考虑.

4.2　重要的参数检验

4.2.1　几个重要例子

以下例子都假定从有关总体中抽出了 i.i.d. 样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$(除例 5、例 6 另有说明外).

例 2　正态总体 $N(\theta, \sigma^2)$,方差 σ^2 已知.要检验:

$$\theta \leqslant \theta_0 : \theta > \theta_0, \tag{4-5}$$

$$\theta = \theta_0 : \theta \neq \theta_0. \tag{4-6}$$

先考虑式(4-5). $\overline{X}$ 是 θ 的估计. 故 $\{\overline{X} > c\}$ 是一个合理检验的否定域. 问题是要根据指定的水平 α 去定出 c. 易证: $c = \theta_0 + \sigma u_\alpha/\sqrt{n}$ 适合要求. 因为当 c 如此定时, 检验的功效函数为

$$\beta(\theta) = P_\theta\left(\overline{X} > \theta_0 + \frac{\sigma u_\alpha}{\sqrt{n}}\right)$$

$$= P_\theta\left(\frac{\sqrt{n}(\overline{X} - \theta)}{\sigma} > u_\alpha + \sqrt{n}(\theta_0 - \theta)\right).$$

因为 $\sqrt{n}(\overline{X} - \theta)/\sigma \sim N(0,1)$, 且当 $\theta \leqslant \theta_0$ 时 $\theta_0 - \theta \geqslant 0$, 故

$$\beta(\theta) \leqslant P_\theta(N(0,1) > u_\alpha) = \alpha \qquad (\forall \theta \leqslant \theta_0). \tag{4-7}$$

上式中后一等式根据 u_α 的定义得出. 由上式知此检验的水平为 α. α 不能再减小, 因当 $\theta = \theta_0$ 时式(4-7) 等号成立.

检验问题式(4-5) 称为单侧检验问题, 因原假设与对立假设各处一边. 检验为

$$\begin{cases} \left\{\overline{X} > \theta_0 + \dfrac{\sigma u_\alpha}{\sqrt{n}}\right\} \Rightarrow \text{否定;} \\ \left\{\overline{X} \leqslant \theta_0 + \dfrac{\sigma u_\alpha}{\sqrt{n}}\right\} \Rightarrow \text{接受.} \end{cases} \tag{4-8}$$

这称为单侧检验. 与此相对, 检验问题式(4-6) 称为双侧检验问题. 为找出其一个检验, 推理类似: $\overline{X} - \theta_0$ 是 $\theta - \theta_0$ 的估计. 如果 $|\overline{X} - \theta_0|$ 较大, 则 $\theta = \theta_0$ 不像会成立. 故以 $|\overline{X} - \theta_0| > c$ 作为否定域的检验, 是一个合理的检验. 为达到指定的水平 α, 应取

$$c = \frac{\sigma u_{\alpha/2}}{\sqrt{n}},$$

则

$$\begin{cases} \left\{|\overline{X} - \theta_0| > \dfrac{\sigma u_{\alpha/2}}{\sqrt{n}}\right\} \Rightarrow \text{否定;} \\ \left\{|\overline{X} - \theta_0| \leqslant \dfrac{\sigma u_{\alpha/2}}{\sqrt{n}}\right\} \Rightarrow \text{接受.} \end{cases} \tag{4-9}$$

例3 同例2, 但方差 σ^2 也未知.

推理与例2相似. 有一点变动是: σ 要用其估计 S(S^2 为样本方差) 代替. 相应地, u_α 和 $u_{\alpha/2}$ 应以 t 分布的上侧分位点 $t_{n-1}(\alpha)$ 和 $t_{n-1}(\alpha/2)$ 代替, 即对于式(4-5), 一个水平 α 检验为

$$\begin{cases} \left\{\overline{X} > \theta_0 + \dfrac{St_{n-1}(\alpha)}{\sqrt{n}}\right\} \Rightarrow \text{否定;} \\ \left\{\overline{X} \leqslant \theta_0 + \dfrac{St_{n-1}(\alpha)}{\sqrt{n}}\right\} \Rightarrow \text{接受.} \end{cases} \tag{4-10}$$

而对于式(4-6), 一个水平 α 检验为

$$\begin{cases}\left\{|\overline{X}-\theta_0|>\dfrac{St_{n-1}(\frac{\alpha}{2})}{\sqrt{n}}\right\}\Rightarrow 否定; \\ \left\{|\overline{X}-\theta_0|\leqslant\dfrac{St_{n-1}(\frac{\alpha}{2})}{\sqrt{n}}\right\}\Rightarrow 接受.\end{cases} \tag{4-11}$$

式(4-10)和式(4-11)可分别称为单侧和双侧的 t 检验,它们是很常用的重要检验.

例4 同例2,但 σ^2 未知,且所要检验的假设是:

$$\sigma^2 \leqslant \sigma_0^2 : \sigma^2 > \sigma_0^2. \tag{4-12}$$

$$\sigma^2 = \sigma_0^2 : \sigma^2 \neq \sigma_0^2. \tag{4-13}$$

先考虑式(4-12).因 S^2 是 σ^2 的估计,一个合理的检验是以 $S^2 > c$ 为否定域,取 $c = \chi_{n-1}^2(\alpha)\sigma_0^2/(n-1)$ 可满足水平为 α 的要求,因

$$P_\sigma\left(S^2 > \chi_{n-1}^2(\alpha)\frac{\sigma_0^2}{n-1}\right) = P_\sigma\left((n-1)\frac{S^2}{\sigma^2} > \chi_{n-1}^2(\alpha)\frac{\sigma_0^2}{\sigma^2}\right),$$

按1.3.4小节2.的(2)的结果,$(n-1)S^2/\sigma^2 \sim \chi_{n-1}^2$.又当 $\sigma^2 \leqslant \sigma_0^2$ 时,$\sigma_0^2/\sigma^2 \geqslant 1$.由此知该检验的功效函数

$$\beta(\sigma) = P\left(\chi_{n-1}^2 > \frac{\chi_{n-1}^2(\alpha)\sigma_0^2}{\sigma^2}\right) \leqslant P(\chi_{n-1}^2 > \chi_{n-1}^2(\alpha)) = \alpha \qquad (\sigma \leqslant \sigma_0).$$

这就证明了该检验有水平 α.α 不能再减小,因为当 $\sigma = \sigma_0$ 时上式等号成立.

对于检验问题式(4-13),直观上看,S^2 太大或太小,都像是与 $\sigma^2 = \sigma_0^2$ 不合.故接受域应有 $c_1 \leqslant S^2 \leqslant c_2$ 的形式.为达到水平 α,一个取法是

$$c_1 = \frac{\chi_{n-1}^2(1-\frac{\alpha}{2})\sigma_0^2}{n-1}, \quad c_2 = \frac{\chi_{n-1}^2(\frac{\alpha}{2})\sigma_0^2}{n-1},$$

则

$$\begin{cases}\left\{\dfrac{\chi_{n-1}^2(1-\frac{\alpha}{2})\sigma_0^2}{n-1} \leqslant S^2 \leqslant \dfrac{\chi_{n-1}^2(\frac{\alpha}{2})\sigma_0^2}{n-1}\right\}\Rightarrow 接受; \\ \left\{\dfrac{\chi_{n-1}^2(1-\frac{\alpha}{2})\sigma_0^2}{n-1} > S^2 > \dfrac{\chi_{n-1}^2(\frac{\alpha}{2})\sigma_0^2}{n-1}\right\}\Rightarrow 否定.\end{cases} \tag{4-14}$$

不难验证,它确有水平 α.

例5 设 $X_1, X_2, \cdots, X_{n_1}$ 和 $Y_1, Y_2, \cdots, Y_{n_2}$ 分别是从正态总体 $N(\mu_1, \sigma^2)$ 和 $N(\mu_2, \sigma^2)$ 中抽出的 i.i.d. 样本,要检验:

$$\mu_2 - \mu_1 \leqslant a : \mu_2 - \mu_1 > a, \tag{4-15}$$

$$\mu_2 - \mu_1 = a : \mu_2 - \mu_1 \neq a, \tag{4-16}$$

其中 a 为给定的数.记

$$S = \left\{(n_1+n_2)\frac{\sum_{i=1}^{n_1}(X_i-\overline{X})^2 + \sum_{j=1}^{n_2}(Y_j-\overline{Y})^2}{(n_1+n_2-2)n_1n_2}\right\}^{1/2}.$$

与例3类似地推理,并利用1.3.4节2.的(4)的结果,得出式(4.15)的一个水平 α 检验为

$$\begin{cases}\{(\bar{Y}-\bar{X})-a > S t_{n_1+n_2-2}(\alpha)\} \Rightarrow \text{否定;}\\ \{(\bar{Y}-\bar{X})-a \leqslant S t_{n_1+n_2-2}(\alpha)\} \Rightarrow \text{接受.}\end{cases} \tag{4-17}$$

而式(4-16)的一个水平 α 检验为

$$\begin{cases}\{|(\bar{Y}-\bar{X})-a| > S t_{n_1+n_2-2}(\frac{\alpha}{2})\} \Rightarrow \text{否定;}\\ \{|(\bar{Y}-\bar{X})-a| \leqslant S t_{n_1+n_2-2}(\frac{\alpha}{2})\} \Rightarrow \text{接受.}\end{cases} \tag{4-18}$$

式(4-17)和式(4-18)分别称为单侧和双侧的两样本 t 检验,它们在应用上是很重要的检验.

例6　同例5,但两个总体分布分别为 $N(\mu_1,\sigma_1^2)$ 和 $N(\mu_2,\sigma_2^2)$, μ_1,μ_2,σ_1^2 和 σ_2^2 都未知,要检验:

$$\frac{\sigma_2^2}{\sigma_1^2} \leqslant a : \frac{\sigma_2^2}{\sigma_1^2} > a, \tag{4-19}$$

$$\frac{\sigma_2^2}{\sigma_1^2} = a : \frac{\sigma_2^2}{\sigma_1^2} \neq a, \tag{4-20}$$

其中 $a > 0$ 是一个给定的数.

与例4一样地推理,并利用1.3.4节2.的(3)的结果,可得式(4-19)的一个检验为

$$\begin{cases}\left\{\dfrac{S_2^2}{aS_1^2} > F_{n_1-1,n_2-1}(\alpha)\right\} \Rightarrow \text{否定;}\\ \left\{\dfrac{S_2^2}{aS_1^2} \leqslant F_{n_1-1,n_2-1}(\alpha)\right\} \Rightarrow \text{接受.}\end{cases}$$

式(4-20)的一个检验为

$$\begin{cases}\left\{F_{n_1-1,n_2-1}(1-\frac{\alpha}{2}) \leqslant \dfrac{S_2^2}{a S_1^2} \leqslant F_{n_1-1,n_2-1}(\frac{\alpha}{2})\right\} \Rightarrow \text{接受;}\\ \left\{F_{n_1-1,n_2-1}(1-\frac{\alpha}{2}) > \dfrac{S_2^2}{a S_1^2} > F_{n_1-1,n_2-1}(\frac{\alpha}{2})\right\} \Rightarrow \text{否定.}\end{cases}$$

例7　总体为指数分布, $x \geqslant 0$ 时为 $\theta^{-1}e^{-x/\theta}$, $x < 0$ 时为0, $\theta > 0$. 要检验假设

$$\theta \leqslant \theta_0 : \theta > \theta_0, \tag{4-21}$$

$$\theta = \theta_0 : \theta \neq \theta_0, \tag{4-22}$$

其中 $\theta_0 > 0$ 为给定的数.

因 $\bar{X}$ 为 θ 的估计,式(4-21)的一个适当检验应有否定域 $\bar{X} > c$. 为根据水平 α 确定 c,利用 $\sum_{i=1}^{n} X_i/\theta = n\bar{X}/\theta \sim \chi_{2n}^2$,得 $c = \theta_0 \chi_{2n}^2(\alpha)/n$. 于是得出检验为

$$\begin{cases}\left\{\overline{X} > \dfrac{\theta_0\chi_{2n}^2(\alpha)}{n}\right\} \Rightarrow \text{否定};\\ \left\{\overline{X} \leqslant \dfrac{\theta_0\chi_{2n}^2(\alpha)}{n}\right\} \Rightarrow \text{接受}.\end{cases} \tag{4-23}$$

类似地,得出式(4-22)的一个水平 α 检验为

$$\begin{cases}\left\{\dfrac{\theta_0\chi_{2n}^2(1-\frac{\alpha}{2})}{n} \leqslant \overline{X} \leqslant \dfrac{\theta_0\chi_{2n}^2(\frac{\alpha}{2})}{n}\right\} \to \text{接受};\\ \left\{\dfrac{\theta_0\chi_{2n}^2(1-\frac{\alpha}{2})}{n} > \overline{X} > \dfrac{\theta_0\chi_{2n}^2(\frac{\alpha}{2})}{n}\right\} \Rightarrow \text{否定}.\end{cases} \tag{4-24}$$

对第3章例6中提到的定数截尾试验,也可按同样的方式决定式(4-21)和式(4-22)的水平 α 检验.

例8　对于两点分布式(4-1),检验假设:

$$\theta \leqslant \theta_0;\theta > \theta_0. \tag{4-25}$$

样本和 $T = \sum_{i=1}^{n} X_i$ 服从二项分布 $B(n,\theta)$. 直观上看,以 $T > c$ 为否定域的检验是可取的.为选择 c 使水平等于给定的 α,亦即使

$$\sum_{i=c+1}^{n}\binom{n}{i}\theta^i(1-\theta)^{n-i} \leqslant \alpha \qquad (0 < \theta < \theta_0). \tag{4-26}$$

可以证明:式(4-26)左边作为 θ 的函数,是 θ 的非减函数.故只须选择整数 c,使

$$\sum_{i=c+1}^{n}\binom{n}{i}\theta_0^i(1-\theta_0)^{n-i} = \alpha \tag{4-27}$$

即可.这需要查二项分布表,或利用恒等式

$$\sum_{i=c+1}^{n}\binom{n}{i}\theta_0^i(1-\theta_0)^{n-i} = \frac{n!}{c!(n-c-1)!}\int_0^{\theta_0} t^c(1-t)^{n-c-1}\mathrm{d}t,$$

通过查不完全B函数表去确定之.但是,严格适合式(4-27)的整数 c 不一定存在.这时要先确定整数 c,使

$$\sum_{i=c+1}^{n}\binom{n}{i}\theta_0^i(1-\theta_0)^{n-i} < \alpha < \sum_{i=c}^{n}\binom{n}{i}\theta_0^i(1-\theta_0)^{n-i}, \tag{4-28}$$

取 $\{T > c\}$ 或 $\{T > c-1\}$ 为否定域.若取前者,则检验的水平将略低于 α;若取后者则将略大于 α.

在 n 很大时,查表不易.这时可用大样本方法,即利用中心极限定理:

$$\frac{\sqrt{n}(\overline{X}-\theta)}{\sqrt{\overline{X}(1-\overline{X})}} \sim N(0,1),$$

取

$$\frac{\sqrt{n}(\overline{X}-\theta_0)}{\sqrt{\overline{X}(1-\overline{X})}} > u_\alpha$$

作为否定域.

例9　考虑负二项分布. 一事件 A 在一次试验中出现(成功)的概率为 θ,不出现(失败)的概率为 $1-\theta$. 取定一个自然数 k,重复作试验,直到有 k 次成功为止. 以 X 记到这时共失败的试验次数,则 X 可取 $0,1,2,\cdots$ 为值,其分布

$$P_\theta(X=i)=\binom{k+i-1}{k-1}\theta^k(1-\theta)^i \qquad (i=0,1,2,\cdots),$$

称为负二项分布. 现设观察了 X,要检验式(4-25).

这可以看作是检验废品率的另一种作法,即一个一个地从一批中抽取产品,直到发现 k 个废品为止(为保持各次抽样的 i.i.d. 性,要假定批量非常大,或作放回抽样),以到此时为止所抽出的合格品个数,来检验废品率 $\theta\leqslant\theta_0$. 从直观上看,当 θ 小时 X 应当大. 故一个合适的检验是有否定域 $X\leqslant c$. 整数 c 根据关系式

$$\sum_{i=0}^{c}\binom{k+i-1}{k-1}\theta_0^k(1-\theta_0)^i=\alpha$$

确定. 若这样的整数 c 不存在,则要按例8中的做法去处理.

例8和例9表明,有时为研究一个实际问题可以建立不同的统计模型. 这就有一个模型的选择问题.

4.2.2　假设检验与区间估计的关系

这二者有密切的关系,由其一可以得其二. 具体地说:

(1) 若 $\mathscr{S}(X)$ 是 θ 的 $(1-\alpha)$ 置信区间,则对于给定的 θ_0, $\{X:\theta_0\in\mathscr{S}(X)\}$ 是 $\theta=\theta_0:\theta\neq\theta_0$ 的一个水平 α 检验的接受域;

(2) 若 $A(\theta_0)$ 是 $\theta=\theta_0:\theta\neq\theta_0$ 的一个水平 α 检验的接受域,令 $\mathscr{S}(X)=\{\theta: X\in A(\theta)\}$,则当 $\mathscr{S}(X)$ 是一个区间时,它即是 θ 的一个 $(1-\alpha)$ 置信区间.

例10　考虑例3. 按第3章例2,

$$\mathscr{S}(X)=\left[\overline{X}-\frac{St_{n-1}(\frac{\alpha}{2})}{\sqrt{n}},\overline{X}+\frac{St_{n-1}(\frac{\alpha}{2})}{\sqrt{n}}\right]$$

是 μ 的 $(1-\alpha)$ 置信区间. 给定 μ_0,则 $\{X:\mu_0\in S(X)\}$ 表示

$$\overline{X}-\frac{St_{n-1}(\frac{\alpha}{2})}{\sqrt{n}}\leqslant\mu_0\leqslant\overline{X}+\frac{St_{n-1}(\frac{\alpha}{2})}{\sqrt{n}},$$

即

$$|\overline{X}-\mu_0|\leqslant\frac{1}{\sqrt{n}}St_{n-1}(\frac{\alpha}{2}).$$

按式(4-11),这正是 $\mu=\mu_0:\mu\neq\mu_0$ 的水平 α 检验的接受域. 反过来,从这个接受域出发,也可得到 μ 的 $(1-\alpha)$ 置信区间是 $\mathscr{S}(X)$.

与此相似,单侧检验则与置信限相应.

(3) 若 $\mathscr{S}(X)$ 是 θ 的一个 $(1-\alpha)$ 置信下限,则对给定的 θ_0, $\{X:\mathscr{S}(X)\leqslant\theta_0\}$

是 $\theta \leqslant \theta_0:\theta > \theta_0$ 的一个水平 α 检验的接受域.

(4) 若 $A(\theta_0)$ 是 $\theta \leqslant \theta_0:\theta > \theta_0$ 的一个水平 α 检验接受域,而集 $\{\theta: X \in A(\theta)\}$ 有 $[\mathscr{S}(X), \infty)$ 的形状,则 $\mathscr{S}(X)$ 是 θ 的一个 $(1-\alpha)$ 置信下限(这一条是(2)的特例).

如对于例3,按第3章例2,

$$\mathscr{S}(X) = \overline{X} - \frac{St_{n-1}(\alpha)}{\sqrt{n}}$$

是 θ 的 $(1-\alpha)$ 置信下限.集 $\{X:\mathscr{S}(X) \leqslant \theta_0\}$ 就是 $\overline{X} \leqslant \theta_0 + St_{n-1}(\alpha)/\sqrt{n}$.按式(4-10),它是 $\theta \leqslant \theta_0:\theta > \theta_0$ 的水平 α 检验的接受域.

这种对应关系有理论上的意义:一方的某些优良性质,有时可以渡给其对应方.

4.2.3 检验的优良性质

1. 一致最优检验

前面已提及,对检验问题式(4-3),要求检验满足约束式(4-4),并在这个前提下,使 $\beta_T(\theta)$ 在 $\theta \in \Theta_1$ 时尽可能大.如果它对一切 $\theta \in \Theta_1$ 都达到最大,则称检验 T 是水平 α 的**一致最优检验**(uniformly most powerful test),简称为 UMPT.这表示:对于式(4-3)的任何一个水平 α 检验 T^*,都有

$$\beta_{T^*}(\theta) \leqslant \beta_T(\theta) \qquad (\forall \theta \in \Theta_1).$$

一致性的含义就是对于一切 $\theta \in \Theta_1$ 同时成立.

UMPT 的要求很高.除了个别单参数的单侧假设检验问题之外,其余情况多不存在 UMPT.

对于单侧检验问题,一种可能求得其 UMPT(如果存在)的方法如下.

在 $\theta \leqslant \theta_0:\theta > \theta_0$ 时,任取 $\theta_1 > \theta_0$ 而考虑检验问题

$$\theta = \theta_0:\theta = \theta_1. \tag{4-29}$$

它的水平 α 的 UMPT 必存在,记为 T_{θ_1}.如果以下两个条件满足:

(1) T_{θ_1} 与 θ_1 无关,可记为 T;

(2) T 的功效函数 $\beta_T(\theta)$ 满足约束式(4-4),

则 T 是 $\theta \leqslant \theta_0:\theta > \theta_0$ 的水平 α 的 UMPT.理由是显然的.

求式(4-29)的 UMPT 时,奈曼 - 皮尔逊有一个方法,被称为奈曼 - 皮尔逊基本引理:以 $f(x,\theta_0)$ 和 $f(x,\theta_1)$ 分别记在 $\theta = \theta_0$ 和 $\theta = \theta_1$ 时样本 X 的概率密度(或概率函数),则对于适当选择的常数 k,以 $\{X:f(x,\theta_1)/f(x,\theta_0) > k\}$ 为否定域的检验,是式(4-29)的 UMPT.

例 11 考虑检验问题式(4-5).此处 $(X = (X_1, X_2, \cdots, X_n))$,

$$f(x,\theta) = (\sqrt{2\pi}\,\sigma)^{-1}\exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \theta)^2}{2\sigma^2}\right).$$

故

$$\frac{f(x,\theta_1)}{f(X,\theta_0)} = \exp\left(\frac{n(\theta_0^2-\theta_1^2)}{2\sigma^2}\right)\exp\left(\frac{n(\theta_1-\theta_0)\bar{X}}{\sigma^2}\right).$$

由于 $\theta_1-\theta_0>0$，使此比值大于 k，相当于要求 $\bar{X}$ 大于某常数 c：$\bar{X}>c$。取

$$c=\theta_0+\frac{\sigma u_\alpha}{\sqrt{n}}.$$

得到以 $\bar{X}>c$ 为否定域的检验（作为式(4-5)的检验）有水平 α，故它就是式(4-5)的水平 α 的 UMPT。因为 c 与 θ_1 无关，上述条件(1)满足；又按例2中的论证，条件(2)也满足。

使用同样的方法可以证明：例7和例8中求出的检验，都是水平 α 的 UMPT。对于例4中的检验问题式(4-12)，也可以证明：以

$$S^2>\frac{\chi_{n-1}^2(\alpha)\sigma_0^2}{n-1}$$

为否定域的检验，是水平 α 的 UMPT。但因此例涉及两个未知参数，前述方法已不可用，其证明较复杂，不在此细述。

2. 一致最优无偏检验

因为 UMPT 经常不存在，只好把要求降低一些，缩小所考虑的检验的范围，再去找最优者。无偏性的要求是一个重要例子。

考虑检验问题式(4-3)。设 T 是一个水平 α 检验，如果它满足

$$\beta_T(\theta)\geqslant\alpha \qquad (\forall\theta\in\Theta_1),$$

则称 T 是式(4-3)的一个水平 α 的无偏检验。

T 的无偏性表示：在原假设不正确时，原假设被否定的概率，不应小于在它正确时而被（错误地）否定的概率。这看上去是一个合理的要求。

记 $U(\alpha)$ 为式(4-3)的一切水平 α 无偏检验的集，$T\in U(\alpha)$。若对于任何 $T^*\in U(\alpha)$，成立

$$\beta_{T^*}(\theta)\leqslant\beta_T(\theta) \qquad (\forall\theta\in\Theta_1),$$

则称 T 是式(4-3)的一个水平 α 的**一致最优无偏检验**(UMPUT)。

奈曼-皮尔逊在其20世纪20至30年代的合作工作中，发展了一些求 UMPUT 的方法，因其太复杂不能在此介绍。这些方法也只适用于若干特殊的分布，且只能涉及一个参数。几个重要的例子是：例3、例5中的 t 检验（单、双侧）；例4中检验问题 $\sigma^2\geqslant\sigma_0^2:\sigma^2<\sigma_0^2$，以

$$\left\{S^2<\frac{\chi_{n-1}^2(1-\alpha)\sigma_0^2}{n-1}\right\}$$

为否定域检验式(4-12)已是 UMPT，当然也是 UMPUT；至于例4的式(4-13)，UMPUT 也存在，但与该例中给出的检验略有差别。

4.3 若干重要的非参数检验

如果总体分布族是非参数性的，则有关它的检验问题，也称为非参数性的检

验.处理这种检验问题的方法,称为非参数检验法.非参数检验涉及的范围很广,此处只介绍几个应用上比较重要的检验法.

4.3.1　皮尔逊的 χ^2 拟合优度检验

1.理论分布完全已知的情况

设根据某一理论、学说甚至假定,某随机变量应当有分布 F,现在对 X 进行 n 次观察,得 i.i.d.样本 $X_1,X_2,\cdots,X_n$,要据以检验"X 有分布 F"这个(原)假设.

这里虽没有明确指出对立假设,但可以说,对立假设是"X 的分布不是 F".本问题的真实含义是估量实测数据与该理论或学说符合得怎么样,而不在于当认为不符合时,X 可能备择的分布如何.故问题中不明确标出对立假设,反而使人感到提法更为贴近现实.早期(奈曼-皮尔逊之前)研究假设检验的学者,包括此处讨论的皮尔逊的拟合优度检验和费希尔的显著性检验,都是持这样一种看法.明确对立假设是奈曼-皮尔逊理论中的重要因素,也是为使检验问题提升为一个数学最优化问题的必要之举.从实用的观点看,在有些问题中,当原假设不成立时,人们对对立假设可能的方向预先有了解,会有助于挑选一个功效更高的检验.

上述问题的检验方法是,把数轴 $(-\infty,\infty)$ 分成 k 个区间:

$$I_1=(-\infty,a_1),I_2=[a_1,a_2),\cdots,I_k=[a_{k-1},\infty).$$

记这些区间的理论概率分别为

$$p_1,p_2,\cdots,p_k:p_j=P(X\in I_j)\qquad(j=1,2,\cdots,k).$$

以 n_j 记 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 中落在 I_j 内的个数,则在原假设成立之下,n_j 的期望值为 np_j. n_j 与 np_j 的差距 $(j=1,2,\cdots,k)$ 可视为理论与观察之间偏离的衡量,将它结合起来形成一个综合指标:$\sum_{j=1}^{k}c_j(n_j-np_j)^2$,$c_j>0$ 为适当的常数.皮尔逊取 $c_j=(np_j)^{-1}$,得

$$K=\sum_{j=1}^{k}\frac{(n_j-np_j)^2}{np_j},$$

K 称为皮尔逊 χ^2 统计量.皮尔逊证明了如下的重要结果:当原假设成立而 $n\to\infty$ 时,K 依分布收敛于自由度 $k-1$ 的 χ^2 分布

$$K\xrightarrow{\text{d.}}\chi^2_{k-1}\qquad(n\to\infty).\tag{4-30}$$

在这个基础上就可以引进一个大样本检验:给定水平 α,然后,

$$\begin{cases}\{K>\chi^2_{k-1}(\alpha)\}\Rightarrow\text{否定原假设};\\\{K\leqslant\chi^2_{k-1}(\alpha)\}\Rightarrow\text{接受}.\end{cases}\tag{4-31}$$

这就是奈曼-皮尔逊的 χ^2 **拟合优度检验**.

这个问题还可以讨论得更细一些.按式(4-31),只要 K 大于 $\chi^2_{k-1}(\alpha)$,就否定原假设.但是,一个远大于 $\chi^2_{k-1}(\alpha)$ 的 K 和一个只略大于 $\chi^2_{k-1}(\alpha)$ 的 K,意义有所不同,前者否定原假设的理由更强些.为反映这一点,在计算出 K 值后,可计算概率

$$Q(K) = P(\chi^2_{k-1} > K). \tag{4-32}$$

它可称为所得数据与原假设的拟合优度. $Q(K)$ 愈大,支持原假设的证据就愈强. 给定水平 α 不过是规定一个阈值. 一旦 $Q(K) < \alpha$,就否定原假设.

例12 某工厂分早、中、晚三个班次,一段时间内出了15次事故,分别是早班5次、中班2次、晚班8次,因而怀疑事故可能性大小与班次有关. 要求检验这一设想.

立定一个原假设:"事故发生率与班次无关". 按此,15次事故中各班理论事故发生次数都应为5次,因而算出

$$K = \left(\frac{(5-5)^2}{5} + \frac{(5-2)^2}{5} + \frac{(5-8)^2}{5}\right)次 = 3.6次.$$

取 $\alpha = 0.05$. 此处 $K = 3$,查 χ^2 分布表,有 $\chi^2_{3-1}(0.05) = 5.991$. K 值未超过此数. 故(在给定的水平下)尚不足以否定原假设.

就这个问题,可以作出两点对一切检验问题都适用的观察:

(1) 原先的出发点(理论)是怀疑事故率与班次有关,但例中却把其对立面作为原假设. 之所以这样做,是因为不希望在证据不充足的情况下轻率作出"事故率与班次有关"的结论,以其对立面作原假设有助于做到这一点. 当然,也可以立定原假设为"事故率对三个班次呈5∶2∶8之比". 这时,所得数据将通过这个原假设. 可见,数据在统计上如何解释,与提问题的出发点有很大的关系.

(2) 就本例而言,原假设未被否定,只是说明"否定原假设的证据尚不充足",并非说它证实了原假设. 这可能是由于数据量不够造成的. 事实上,若再观察一段得到30次事故,如早、中、晚三班各为10次、4次和16次,仍呈5∶2∶8之比,则K值为 $7.2 > 5.991$,就可以否定原假设了.

因此,从现实的角度看,上例的结论可能是,尽管数据未提供充足的证据,但5∶2∶8的巨大差距,有理由要认真考虑事故率与班次确有关系的可能. 由此可知,检验结果的统计解释不能与其现实含义混为一谈.

在应用上还有一个区间 $I_1, I_2, \cdots, I_k$ 的个数和位置的取法问题. 总的原则是个数不能太少,否则太粗糙而不能充分反映原分布 F. 但也不宜过多,以致每区间内样本量太少(n 很大时又当别论). 一般地,至少有5～6个区间,最多12～15个,且每区间样本个数都应不小于5. 在 X 为离散值时(如上例),自然的分法是 X 的每个值组成一组,但有时也有必要把 X 的一些相邻值并成一组. 从理论上讲,分组应在取得样本之前做;而实际工作中往往是根据样本来定分组. 理论上可以证明,这样做将会使极限定理式(4-30)失效. 但在应用上人们往往忽略这个细节. 在统计方法的使用上,这种不拘泥于理论规定的做法时有发生.

2. 理论分布依赖若干未知参数的情况

设有一个依赖 r 个参数 $\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_r$ 的分布族 $\{F(x;\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_r)\}$,要根据样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 去检验"X 的分布属于 $\{F(x, \theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_r)\}$"这个假设. 更具体地说,就是检验"对某参数值 $\theta_1^0, \theta_2^0, \cdots, \theta_r^0$, X 有分布 $F(x;\theta_1^0, \theta_2^0, \cdots, \theta_r^0)$".

解决这个问题的步骤是,先通过样本作出 $(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_r)$ 的 MLE$(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \cdots, \hat{\theta}_r)$,用"$X$ 有分布 $F(x;\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \cdots, \hat{\theta}_r)$"作为原假设,然后按1.的方法去处理. 不同

的是,极限定理式(4-30)中的 χ^2_{k-1} 要改为 χ^2_{k-1-r},即自由度减少了 r.相应地,式(4-31)和式(4-32)中的 $k-1$ 也应改为 $k-1-r$.

这个结果是费希尔在1924年证明的(皮尔逊的结果式(4-30)发表于1900年).起初,皮尔逊没有认识到在有参数的情况下,自由度应减小的事实,而使他与费希尔爆发了一场争论.

这个结果的重要应用有二:一是检验总体的正态性,用 $\overline{X}$ 和 S^2 估计均值方差,如分成 k 个区间,则自由度为 $k-1-2=k-3$;二是可用列联表检验独立性.下面就讨论这个问题.

4.3.2 列联表

设变量 X 取 $a_1,a_2,\cdots,a_r$ 等值,变量 Y 取 $b_1,b_2,\cdots,b_k$ 等值.对 (X,Y) 作 n 次观察,发现 $(X,Y)=(a_i,b_j)$ 的次数为 n_{ij}.要据此检验"X,Y 独立"这个假设.

在应用上,这个问题经常以下述形式出现:X,Y 是个体的两项指标,想了解它们有无关联.例如,X 表示一个人每日吃盐的克数(分 r 个等级),Y 表示此人的血压(分 k 个等级),想了解盐的摄取量与血压高低是否相关.

表 4-1

X	Y					和
	1	$\cdots$	j	$\cdots$	k	
1	n_{11}	$\cdots$	n_{1j}	$\cdots$	n_{1k}	$n_{1\cdot}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
i	n_{i1}	$\cdots$	n_{ij}	$\cdots$	n_{ik}	$n_{i\cdot}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
r	n_{r1}	$\cdots$	n_{rj}	$\cdots$	n_{rk}	$n_{r\cdot}$
和	$n_{\cdot 1}$	$\cdots$	$n_{\cdot j}$	$\cdots$	$n_{\cdot k}$	n

解决这种问题,一般是把数据排列成表4-1所示的表格形式.X 的取值 $a_1,a_2,\cdots,a_r$ 用 $1,2,\cdots,r$ 代替,因为具体数值无关紧要,$a_1,a_2,\cdots,a_r$ 只是表示一个等级而已;同理,Y 的取值 $b_1,b_2,\cdots,b_k$ 用 $1,2,\cdots,k$ 代替.(X,Y) 的值 (i,j) 称为 (i,j) 格.此格内有观察值 n_{ij} 个.$n_{i\cdot}$ 和 $n_{\cdot j}$ 分别表示行和与列和,n 为总和.这种表称为**列联表**.

如果原假设"X,Y 独立"成立,则存在 $p_1,p_2,\cdots,p_r$ 和 $q_1,q_2,\cdots,q_k$,使

$$P(X=i,Y=j)=p_iq_j$$
$$(i=1,2,\cdots,r,j=1,2,\cdots,k).$$

这里只知道 $p_i\geqslant 0,p_1+p_2+\cdots+p_r=1,q_j\geqslant 0,q_1+q_2+\cdots+q_k=1.p_i,q_j$ 等的具体数值并未规定,故这是一个带参数 $(p_1,p_2,\cdots,p_r,q_1,q_2,\cdots,q_k)$ 的拟合优度检验问题.为此,检验这个问题的步骤是先估计这些参数.p_i、q_j 的 MLE 分别为

$$\hat{p}_i=\frac{n_{i\cdot}}{n}\qquad(i=1,2,\cdots,r);$$

$$\hat{q}_j=\frac{n_{\cdot j}}{n}\qquad(j=1,2,\cdots,k).$$

这样得到皮尔逊 χ^2 统计量

$$K=\frac{\sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k}\left(n_{ij}-n\left(\frac{n_{i\cdot}}{n}\right)\left(\frac{n_{\cdot j}}{n}\right)\right)^2}{n\left(\frac{n_{i\cdot}}{n}\right)\left(\frac{n_{\cdot j}}{n}\right)}$$

$$=\frac{\sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{k}(nn_{ij}-n_{i\cdot}n_{\cdot j})^2}{nn_{i\cdot}n_{\cdot j}}, \tag{4-33}$$

然后,再计算其自由度.(X,Y) 的值域一共划分成 rk 个集合(有两种情况:一是 X 取值本来就只有 r 个;一是不止 r 个但已并成 r 组.对 Y 也一样),但估计了一些未知参数.由于 $p_1+p_2+\cdots+p_r=1$,$p_1,p_2,\cdots,p_r$ 中未知参数只有 $r-1$ 个,同理,$q_1,q_2,\cdots,q_k$ 中的未知参数有 $k-1$ 个,故总共有 $r+k-2$ 个未知参数,而 K 的自由度应为

$$(rk-1)-(r+k-2)=(r-1)(k-1).$$

这样,算出 K 值后,查 χ^2 表得 $\chi^2_{(r-1)(k-1)}(\alpha)$.若 K 大于此数,则否定原假设,不然就接受.也可以查 χ^2 表得其拟合优度 $P(\chi^2_{(r-1)(k-1)}>K)$.

当 $r=k=2$ 时,列联表中只有4个格子,称为"四格表".这时式(4-33)简化为

$$K=\frac{n(n_{11}n_{22}-n_{12}n_{21})^2}{n_{1\cdot}n_{2\cdot}n_{\cdot 1}n_{\cdot 2}},$$

其自由度为1.

4.3.3 科尔莫戈罗夫检验

设 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为 X 的i.i.d.样本,要检验假设:"X 的分布为 F",F 是一个连续分布函数.

以 F_n 记 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 的经验分布函数(1.3.2小节),按格利文科定理,至少当 n 较大时,统计量

$$K_n=\sup\{|F_n(x)-F(x)|:-\infty<x<\infty\} \tag{4-34}$$

应取较小之值.于是一个合理的检验是:当 $K_n>c$ 时否定原假设,不然就接受.我国统计学者张里千确定了在原假设成立时 K_n 的确切分布及展开项较多的渐近分布,利用它可以在原则上按给定的水平 α 确定 c 之值,但在 n 较大时,利用科尔莫戈罗夫对 K_n 求出的极限分布去定 c,近似程度也很好:

$$\alpha=0.05\text{时},\quad \text{取}\quad c=\frac{1.358}{\sqrt{n}};$$

$$\alpha=0.01\text{时},\quad \text{取}\quad c=\frac{1.628}{\sqrt{n}}.$$

按式(4-34)计算 K_n 之值看来很不易.但易见,$|F_n(x)-F(x)|$ 的最大值必然在 $F_n(x)$ 的跳跃点处达到.由此易知,若取 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 的次序统计量 $X_{(1)}\leqslant X_{(2)}\leqslant\cdots\leqslant X_{(n)}$,则

$$K_n=\max\left\{\left|\frac{i-1}{n}-F(X_{(i)})\right|,\left|\frac{i}{n}-F(X_{(i)})\right|,i=1,2,\cdots,n\right\}$$

这只涉及 $2n$ 个数的计算.

这个检验称为科尔莫戈罗夫检验,因为科尔莫戈罗夫在 1933 年证明了前述关于 K_n 的极限定理.与皮尔逊 χ^2 检验相比,科尔莫戈罗夫检验不须将样本分组,少了一个任意性,这是其优点.其缺点是只能用在理论分布为一维连续分布且分布完全已知的情形,适用面比皮尔逊检验小.研究也显示:在科尔莫尔罗夫检验可用的场合,其功效一般来说略优于皮尔逊检验.

4.3.4 符号检验

下面用一个简单例子来解释这个检验法.设有两个种子品种 A,B,要比较哪个的产量更高.选择 n 块形状、大小大致相同的田地,每块地的条件比较均匀,但不同地块的条件可以有些差异.把每块地等分为二,随机地决定其中一半用品种 A,另一半用品种 B.收获后,记录下第 i 块内 A,B 品种的产量分别为 $X_{iA}, X_{iB}, i = 1, 2, \cdots, n$.

立定原假设为"A,B 两品种在产量上无差异".为了检验这假设,考虑产量差 $X_i = X_{iA} - X_{iB}$.如果正态等方差假定可以认为成立,则可以把 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 看成是从正态总体 $N(\mu, \sigma^2)$ 中抽出的 i.i.d. 样本.这样,要检验的原假设成为 $\mu = 0$($\mu > 0$ 表示 A 优于 B,$\mu < 0$ 表示 B 优于 A).这就比较容易检验了.但有时没有充分理由能认为正态等方差的假定可以成立.这时符号检验是一个可以考虑的代替办法.

符号检验法的步骤如下.

暂设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 都不为 0.以 Y 记其中取正号的个数,则 Y 将服从二项分布 $B(n, \theta)$,而原假设相当于 $\theta = 1/2$.于是,原问题转化为 $Y \sim B(n, \theta)$,要检验

$$\theta = \frac{1}{2} : \theta \neq \frac{1}{2}.$$

一个合理的检验法为,取否定域 $\{|Y/n - 1/2| > c\}$.选择 c,使

$$P_{1/2}\left(\left|\frac{Y}{n} - \frac{1}{2}\right| > c\right) = \alpha.$$

这相当于找出整数 d,使

$$\sum_{i=0}^{d}\binom{n}{i}2^{-n} = \frac{\alpha}{2}. \tag{4-35}$$

这样,当 $Y = d+1, d+2, \cdots, n-d$ 时接受原假设,不然就否定.可以把 $Y = 0, 1, 2, \cdots, d-1$ 解释为 B 优于 A,$Y = n-d+1, n-d+2, \cdots, n$ 解释为 A 优于 B.如果满足式(4-35)的整数 d 不存在,则须略修改水平 α 之值(参看例 8).

如果 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 中有 m 个为 0(在本例中这种情况出现的机会不多.但在有些问题中,当比较两个对象 A,B 时,若只分"A 比 B 好"、"B 比 A 好"、"A 和 B 无差别"三种判定,则这时 0 出现的机会增多),则去掉它们,保留 $N = n - m$ 个不为 0 者,用这个 N 作为上述方法中的 n.

这种检验叫做**符号检验**,因为它只利用了 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 中各量的符号.这种检验方法可能是历史上最早被使用的检验法.1710 年,阿布斯罗特(Arbuthnott)用这个方法检验了生男多于生女是出于偶然还是神的意旨(自然规律).符号检验看起

来用的信息量很少，但在 n 不太小时，它还是有较好的表现. 其突出的优点是对总体分布没有多少要求，适用面广.

本例中田块的安排体现了一种简单的试验设计，目的是使结果有可比性. 如果 A 种在一块好地上而 B 种在一块差地上，其结果就不可比了. 试验设计的讨论可参看本书第三篇“试验设计”.

4.3.5 秩检验

定义 1 设样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 之值没有相同的，以 R_i 记 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 中其值不超过 X_i 的个数，$i = 1, 2, \cdots, n$，则称 R_i 为 X_i(在 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 中)的秩. 秩是该样本在全部样本中由小到大的位次，最小的样本秩为 1，最大的为 n. $(R_1, R_2, \cdots, R_n)$ 称为**秩统计量**，任何只与样本的秩有关的统计量也称为秩统计量. 基于秩统计量的统计推断方法，称为秩方法.

例 13 甲、乙两厂都生产同一种产品，其质量指标是愈大愈优. 为检验这两厂的产品质量有无差异，从甲厂中抽取 n_1 个产品，测得其质量指标为 $X_1, X_2, \cdots, X_{n_1}$，从乙厂中抽取 n_2 个产品，测得其质量指标为 $Y_1, Y_2, \cdots, Y_{n_2}$. 假定甲厂产品质量指标 X 有分布 $F(x)$，$F(x)$ 未知，乙厂产品质量指标 Y 的均值比 X 的均值相差 θ，即 Y 的分布等于 $X + \theta$ 的分布，因而 Y 有分布 $F(x - \theta)$. 这样，

$X_1, X_2, \cdots, X_{n_1}$ 为 i.i.d. 样本，有公共分布 $F(x)$，

$Y_1, Y_2, \cdots, Y_{n_2}$ 为 i.i.d. 样本，有公共分布 $F(x - \theta)$.

如果检验的目的是想证实“乙厂质量优于甲”，则应以其反面，即“$\theta \leqslant 0$”作为原假设. 因此有关的检验问题是：

$$\theta \leqslant 0 ; \theta > 0. \tag{4-36}$$

如果检验的目的是想证实“甲、乙两厂质量有差异”，则应以其反面，即“$\theta = 0$”作为原假设：

$$\theta = 0 ; \theta \neq 0. \tag{4-37}$$

先讨论式(4-36). 把全部样本 $X_1, X_2, \cdots, X_{n_1}, Y_1, Y_2, \cdots, Y_{n_2}$ 放在一起比较，来确定各样本的秩. 记 R_i 为 Y_i 的秩，$i = 1, 2, \cdots, n_2$，$R = R_1 + R_2 + \cdots + R_{n_2}$ 为 Y 样本的秩和. 例如，若 X 样本为 2.54，2.56，Y 样本为 2.55，2.53 和 2.57，则 $R_1 = 3$，$R_2 = 1$，$R_3 = 5$，而 $R = 3 + 1 + 5 = 9$. 显然，当 $\theta > 0$ 时，乙厂产品相对于甲厂而言，其质量指标取大值者多，因而，R 应倾向于取大值. 于是，一个合理的检验法是：

$$\begin{cases} \{R > c\} \Rightarrow \text{否定 } \theta \leqslant 0; \\ \{R \leqslant c\} \Rightarrow \text{接受}. \end{cases} \tag{4-38}$$

这个检验叫做维尔柯克逊的**两样本秩和检验**. 它是维尔柯克逊(F. Wilcoxon)在 1945 年提出的，是一个著名的秩检验. 维尔柯克逊证明了下面的极限定理：若 $\theta = 0$ 即 $X_1, X_2, \cdots, X_{n_1}, Y_1, Y_2, \cdots, Y_{n_2}$ 全体为 i.i.d.，则在 n_1 和 n_2 都 $\to \infty$ 时，有

$$\frac{R-(n_1+n_2+1)\frac{n_2}{2}}{\sqrt{\frac{n_1n_2(n_1+n_2+1)}{12}}}\xrightarrow{\text{d.}}N(0,1). \tag{4-39}$$

依此,可以在 n_1 和 n_2 都较大时,按给定的水平 α 决定式(4-38)中的 c,

$$c=(n_1+n_2+1)\frac{n_2}{2}+u_\alpha\sqrt{\frac{n_1n_2(n_1+n_2+1)}{12}}.$$

在 n_1 和 n_2 都较小时,有专为此检验而计算的统计表可查.

对于检验问题式(4-37),应当是在 R 的值过大或过小时否定原假设 $\theta=0$. 按极限定理式(4-39),对于给定水平 α,当 n_1 和 n_2 都较大时,其界限可定为

$$\begin{cases}\left\{\left|R-(n_1+n_2+1)\frac{n_2}{2}\right|\leqslant u_{\alpha/2}\sqrt{\frac{n_1n_2(n_1+n_2+1)}{12}}\right\}\Rightarrow \text{接受原假设;}\\ \left\{\left|R-(n_1+n_2+1)\frac{n_2}{2}\right|> u_{\alpha/2}\sqrt{\frac{n_1n_2(n_1+n_2+1)}{12}}\right\}\Rightarrow \text{否定.}\end{cases} \tag{4-40}$$

检验式(4-38)和式(4-40)分别称为单、双侧的维尔柯克逊检验.

初一看,秩方法由于只利用了样本的大小次序而忽略了其具体值,效率可能会较差,其实不然. 拿本例问题来说,常用的检验法是两样本 t 检验(例5). 然而可以证明:在分布 F 为正态分布时(这时 t 检验最适用),维尔柯克逊检验的效率可达到 t 检验的约95%,所失有限. 一般地,不论 F 为任何分布,维尔柯克逊检验的效率,不低于 t 检验效率的86.4%,且对于某些分布,维尔柯克逊检验的效率可以远高于 t 检验,其界限上不封顶. 换句话说,维尔柯克逊检验(及一切的秩检验)有一个很大的好处:它的性能不大受到未知分布 F 的影响(统计学中称为"分布自由"). 不像 t 检验,当总体分布与正态有偏离时,它的实际水平可与给定值 α 有很大差距,而且功效可能很差.

参 考 文 献

1 陈希孺,倪国熙. 数理统计学教程. 上海:科学技术出版社,1988.
2 (美)Bickel P J等著. 数理统计——基本概念及专题. 李泽慧等译. 兰州:兰州大学出版社,1991.
3 (美)Freedman D 等著. 统计学. 第2版. 魏宗舒,施锡铨等译. 北京:中国统计出版社,1997.
4 茆诗松,王静龙,濮晓龙. 高等数理统计. 北京:高等教育出版社,施普林格出版社,1998.

常用统计数值表

表 1　标准正态分布上侧分位点表

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\lambda}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{2}}\,dt$$

λ	α	λ	α
0.000 000 0	0.500 000 0	2.100 000 0	0.017 864 0
0.100 000 0	0.460 170 0	2.200 000 0	0.013 903 0
0.200 000 0	0.420 740 0	2.300 000 0	0.010 724 0
0.300 000 0	0.382 090 0	2.400 000 0	0.008 197 5
0.400 000 0	0.344 580 0	2.500 000 0	0.006 209 7
0.500 000 0	0.308 540 0	2.600 000 0	0.004 661 1
0.600 000 0	0.274 250 0	2.700 000 0	0.003 467 0
0.700 000 0	0.241 960 0	2.600 000 0	0.002 555 1
0.800 000 0	0.211 860 0	2.900 000 0	0.001 865 8
0.900 000 0	0.184 060 0	3.000 000 0	0.001 349 9
1.000 000 0	0.158 660 0	3.100 000 0	0.000 967 6
1.100 000 0	0.135 670 0	3.200 000 0	0.000 687 1
1.200 000 0	0.115 070 0	3.300 000 0	0.000 483 4
1.300 000 0	0.096 800 0	3.400 000 0	0.000 336 9
1.400 000 0	0.080 757 0	3.500 000 0	0.000 232 6
1.500 000 0	0.066 807 0	3.600 000 0	0.000 159 1
1.600 000 0	0.054 799 0	3.700 000 0	0.000 107 8
1.700 000 0	0.044 565 0	3.800 000 0	$7.234\,805\,5 \times 10^{-5}$
1.800 000 0	0.035 930 0	3.900 000 0	$4.809\,635\,3 \times 10^{-5}$
1.900 000 0	0.028 717 0	4.000 000 0	$3.167\,125\,0 \times 10^{-5}$
2.000 000 0	0.022 750 0		

表2　标准正态分布上侧分位点表

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\lambda}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{2}}\mathrm{d}t$$

α	λ	α	λ
0.200 000 0	0.841 621 2	0.070 000 0	1.475 791 0
0.190 000 0	0.877 896 3	0.060 000 0	1.554 773 6
0.180 000 0	0.915 365 1	0.050 000 0	1.644 853 6
0.170 000 0	0.954 165 3	0.040 000 0	1.750 686 1
0.160 000 0	0.994 457 9	0.030 000 0	1.880 793 6
0.150 000 0	1.036 433 4	0.020 000 0	2.053 748 9
0.140 000 0	1.080 319 3	0.010 000 0	2.326 347 9
0.130 000 0	1.126 391 1	0.005 000 0	2.575 829 3
0.120 000 0	1.174 986 8	0.001 000 0	3.090 232 3
0.110 000 0	1.226 528 1	0.000 500 0	3.290 526 7
0.100 000 0	1.281 551 6	0.000 100 0	3.719 016 5
0.090 000 0	1.340 755 0	0.000 050 0	3.890 591 9
0.080 000 0	1.405 071 6		

表3　t 分布临界值表

n	α			n	α		
	0.10	0.05	0.01		0.10	0.05	0.01
	λ				λ		
1	6.314	12.706	63.657	18	1.734	2.101	2.878
2	2.920	4.303	9.925	19	1.729	2.093	2.861
3	2.353	3.182	5.841	20	1.725	2.086	2.845
4	2.132	2.776	4.604	21	1.721	2.080	2.831
5	2.015	2.571	4.032	22	1.717	2.074	2.819
6	1.943	2.447	3.707	23	1.714	2.069	2.807
7	1.895	2.365	3.409	24	1.711	2.064	2.797
8	1.860	2.306	3.355	25	1.708	2.060	2.787
9	1.833	2.262	3.250	26	1.706	2.056	2.779
10	1.812	2.228	3.169	27	1.703	2.052	2.771
11	1.796	2.201	3.106	28	1.701	2.048	2.763
12	1.782	2.179	3.055	29	1.699	2.045	2.756
13	1.771	2.160	3.012	30	1.697	2.042	2.750
14	1.761	2.145	2.977	40	1.684	2.021	2.704
15	1.753	2.131	2.947	60	1.671	2.000	2.660
16	1.746	2.120	2.921	120	1.658	1.980	2.617
17	1.740	2.110	2.898	∞	1.645	1.960	2.576

注：n 为自由度，λ 为临界值，$P\{|t|>\lambda\}=\alpha$。

表4　χ^2 分布临界值表

n	α			
	0.975	0.05	0.025	0.01
	λ			
1	0.000 98	3.84	5.02	6.63
2	0.050 6	5.99	7.38	9.21
3	0.216	7.81	9.35	11.3
4	0.484	9.49	11.1	13.3
5	0.831	11.07	12.8	15.1
6	1.24	12.6	14.4	16.8
7	1.69	14.1	16.0	18.5
8	2.18	15.5	17.5	20.1
9	2.70	16.9	19.0	21.7
10	3.25	18.3	20.5	23.2
11	3.82	19.7	21.9	24.7
12	4.40	21.0	23.3	26.2
13	5.01	22.4	24.7	27.7
14	5.63	23.7	26.1	29.1
15	6.26	25.0	27.5	30.6
16	6.91	26.3	28.8	32.0
17	7.56	27.6	30.2	33.4
18	8.23	28.9	31.5	34.8
19	8.91	30.1	32.9	36.2
20	9.59	31.4	34.2	37.6
21	10.3	32.7	35.5	38.9
22	11.0	33.9	36.8	40.3
23	11.7	35.2	38.1	41.6
24	12.4	36.4	39.4	43.0
25	13.1	37.7	40.6	44.3
26	13.8	38.9	41.9	45.6
27	14.6	40.1	43.2	47.0
28	15.3	41.3	44.5	48.3
29	16.0	42.6	45.7	49.6
30	16.8	43.8	47.0	50.9

注：n 为自由度，λ 为临界值，$P\{\chi^2 > \lambda\} = \alpha$.

表 5　F 分布临界值表($\alpha = 0.05$)

n_2	n_1: 1	2	3	4	5	6	7	8	12	24	∞
	λ										
1	161.4	199.5	215.7	224.6	230.2	234.0	236.8	238.9	243.9	249.1	254.3
2	18.5	19.0	19.2	19.2	19.3	19.3	19.4	19.4	19.4	19.5	19.5
3	10.1	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.89	8.85	8.74	8.64	8.53
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	5.91	5.77	5.63
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.68	4.53	4.36
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.21	4.15	4.00	3.84	3.67
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.79	3.73	3.57	3.41	3.23
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.50	3.44	3.28	3.12	2.93
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.29	3.23	3.07	2.90	2.71
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.14	3.07	2.91	2.74	2.54
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	3.01	2.95	2.79	2.61	2.40
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.11	3.00	2.91	2.85	2.69	2.51	2.30
13	4.67	3.81	3.41	3.18	3.03	2.92	2.83	2.77	2.60	2.42	2.21
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.76	2.70	2.53	2.35	2.13
15	4.54	3.68	3.29	3.06	2.90	2.79	2.71	2.64	2.48	2.29	2.07
16	4.49	3.63	3.24	3.01	2.85	2.74	2.66	2.59	2.42	2.24	2.01
17	4.45	3.59	3.20	2.96	2.81	2.70	2.61	2.55	2.38	2.19	1.96
18	4.41	3.55	3.16	2.93	2.77	2.66	2.58	2.51	2.34	2.15	1.92
19	4.38	3.52	3.13	2.90	2.74	2.63	2.54	2.48	2.31	2.11	1.88
20	4.35	3.49	3.10	2.87	2.71	2.60	2.51	2.45	2.28	2.08	1.84
21	4.32	3.47	3.07	2.84	2.68	2.57	2.49	2.42	2.25	2.05	1.81
22	4.30	3.44	3.05	2.82	2.66	2.55	2.46	2.40	2.23	2.03	1.78
23	4.28	3.42	3.03	2.80	2.64	2.53	2.44	2.37	2.20	2.01	1.76
24	4.26	3.40	3.01	2.78	2.62	2.51	2.42	2.36	2.18	1.98	1.73
25	4.24	3.39	2.99	2.76	2.60	2.49	2.40	2.34	2.16	1.96	1.71
26	4.23	3.37	2.98	2.74	2.59	2.47	2.39	2.32	2.15	1.95	1.69
27	4.21	3.35	2.96	2.73	2.57	2.46	2.37	2.31	2.13	1.93	1.67
28	4.20	3.34	2.95	2.71	2.56	2.45	2.36	2.29	2.12	1.91	1.65
29	4.18	3.33	2.93	2.70	2.55	2.43	2.35	2.28	2.10	1.90	1.64
30	4.17	3.32	2.92	2.69	2.53	2.42	2.33	2.27	2.09	1.89	1.62
40	4.08	3.23	2.84	2.61	2.45	2.34	2.25	2.18	2.00	1.79	1.51
60	4.00	3.15	2.76	2.53	2.37	2.25	2.17	2.10	1.92	1.70	1.39
120	3.92	3.07	2.68	2.45	2.29	2.17	2.09	2.02	1.83	1.61	1.25
∞	3.84	3.00	2.60	2.37	2.13	2.10	2.01	1.94	1.75	1.52	1.00

注:表中 n_1 是第一自由度(分子的自由度)；

n_2 是第二自由度(分母的自由度)；

λ 是临界值，$P\{F > \lambda\} = \alpha = 0.05$

表 6　F 分布临界值表($\alpha = 0.025$)

n_2	n_1 = 1	2	3	4	5	6	7	8	12	24	∞
	λ										
1	648.8	799.5	864.2	899.6	921.8	937.1	948.2	956.7	976.7	997.2	1 018.3
2	38.51	39.00	39.17	39.25	39.30	39.33	39.36	39.37	39.41	39.46	39.5
3	17.44	16.04	15.44	15.10	14.88	14.73	14.62	14.54	14.34	14.12	13.9
4	12.22	10.65	9.98	9.60	9.36	9.20	9.07	8.98	8.75	8.51	8.26
5	10.01	8.43	7.76	7.39	7.15	6.98	6.85	6.76	6.52	6.28	6.02
6	8.81	7.26	6.60	6.23	5.99	5.82	5.70	5.60	5.37	5.12	4.85
7	8.07	6.54	5.89	5.52	5.29	5.12	4.99	4.90	4.67	4.42	4.14
8	7.57	6.06	5.42	5.05	4.82	4.65	4.53	4.43	4.20	3.95	3.67
9	7.21	5.71	5.08	4.72	4.48	4.32	4.20	4.10	3.87	3.61	3.33
10	6.94	5.46	4.83	4.47	4.24	4.07	3.95	3.85	3.62	3.37	3.08
11	6.72	5.26	4.63	4.28	4.04	3.88	3.76	3.66	3.43	3.17	2.88
12	6.55	5.10	4.47	4.12	3.89	3.73	3.61	3.51	3.28	3.02	2.73
13	6.41	4.97	4.35	4.00	3.77	3.60	3.48	3.39	3.15	2.89	2.60
14	6.30	4.86	4.24	3.89	3.66	3.50	3.38	3.29	3.05	2.79	2.49
15	6.20	4.77	4.15	3.80	3.58	3.41	3.29	3.20	2.96	2.70	2.40
16	6.12	4.69	4.08	3.73	3.50	3.34	3.22	3.12	2.89	2.63	2.32
17	6.04	4.62	4.01	3.66	3.44	3.28	3.16	3.06	2.82	2.56	2.25
18	5.98	4.56	3.95	3.61	3.38	3.22	3.10	3.01	2.77	2.50	2.19
19	5.92	4.51	3.90	3.56	3.33	3.17	3.05	2.96	2.72	2.45	2.13
20	5.87	4.46	3.86	3.51	3.29	3.13	3.01	2.91	2.68	2.41	2.09
21	5.83	4.42	3.82	3.48	3.25	3.09	2.97	2.87	2.64	2.37	2.04
22	5.79	4.38	3.78	3.44	3.22	3.05	2.93	2.84	2.60	2.33	2.00
23	5.75	4.35	3.75	3.41	3.18	3.02	2.90	2.81	2.57	2.30	1.97
24	5.72	4.32	3.72	3.38	3.15	2.99	2.87	2.78	2.54	2.27	1.94
25	5.69	4.29	3.69	3.35	3.13	2.97	2.85	2.75	2.51	2.24	1.91
26	5.66	4.27	3.67	3.33	3.10	2.94	2.82	2.73	2.49	2.22	1.88
27	5.63	4.24	3.65	3.31	3.08	2.92	2.80	2.71	2.47	2.19	1.85
28	5.61	4.22	3.63	3.29	3.06	2.90	2.78	2.69	2.45	2.17	1.83
29	5.59	4.20	3.61	3.27	3.04	2.88	2.76	2.67	2.43	2.15	1.81
30	5.57	4.18	3.59	3.25	3.03	2.87	2.75	2.65	2.41	2.14	1.79
40	5.42	4.05	3.46	3.13	2.90	2.74	2.62	2.53	2.29	2.01	1.64
60	5.29	3.93	3.34	3.01	2.79	2.63	2.51	2.41	2.17	1.88	1.48
120	5.15	3.80	3.23	2.89	2.67	2.52	2.39	2.30	2.05	1.76	1.31
∞	5.02	3.69	3.12	2.79	2.57	2.41	2.29	2.19	1.94	1.64	1.00

注：表中 n_1 是第一自由度(分子的自由度)；

n_2 是第二自由度(分母的自由度)；

λ 是临界值，$P\{F > \lambda\} = \alpha = 0.025$.

表7　F 分布临界值表($\alpha = 0.01$)

n_2	n_1										
	1	2	3	4	5	6	7	8	12	24	∞
	λ										
1	4 052	4 999	5 403	5 625	5 764	5 859	5 928	5 982	6 106	6 234	6 366
2	98.5	99.0	99.2	99.2	99.3	99.3	99.4	99.4	99.4	99.5	99.5
3	34.1	30.8	29.5	28.7	28.2	27.9	27.7	27.5	27.1	26.6	26.1
4	21.2	18.0	16.7	16.0	15.5	15.2	15.0	14.8	14.4	13.9	13.5
5	16.3	13.3	12.1	11.4	11.0	10.7	10.5	10.3	9.89	9.47	9.02
6	13.7	10.9	9.78	9.15	8.75	8.47	8.26	8.10	7.72	7.31	6.88
7	12.2	9.55	8.45	7.85	7.46	7.19	6.99	6.84	6.47	6.07	5.65
8	11.3	8.65	7.59	7.01	6.63	6.37	6.18	6.03	5.67	5.28	4.86
9	10.6	8.02	6.99	6.42	6.06	5.80	5.61	5.47	5.11	4.73	4.31
10	10.0	7.56	6.55	5.99	5.64	5.39	5.20	5.06	4.71	4.33	3.91
11	9.65	7.21	6.22	5.67	5.32	5.07	4.89	4.74	4.40	4.02	3.60
12	9.33	6.93	5.95	5.41	5.06	4.82	4.64	4.50	4.16	3.78	3.36
13	9.07	6.70	5.74	5.21	4.86	4.62	4.44	4.30	3.96	3.59	3.17
14	8.86	6.51	5.56	5.04	4.69	4.46	4.28	4.14	3.80	3.43	3.00
15	8.68	6.36	5.42	4.89	4.56	4.32	4.14	4.00	3.67	3.29	2.87
16	8.53	6.23	5.29	4.77	4.44	4.20	4.03	3.89	3.55	3.18	2.75
17	8.40	6.11	5.18	4.67	4.34	4.10	3.93	3.79	3.46	3.08	2.65
18	8.29	6.01	5.09	4.58	4.25	4.01	3.84	3.71	3.37	3.00	2.57
19	8.18	5.93	5.01	4.50	4.17	3.94	3.77	3.63	3.30	2.92	2.49
20	8.10	5.85	4.94	4.43	4.10	3.87	3.70	3.56	3.23	2.86	2.42
21	8.02	5.78	4.87	4.37	4.04	3.81	3.64	3.51	3.17	2.80	2.36
22	7.95	5.72	4.82	4.31	3.99	3.76	3.59	3.45	3.12	2.75	2.31
23	7.88	5.66	4.76	4.26	3.94	3.71	3.54	3.41	3.07	2.70	2.26
24	7.82	5.61	4.72	4.22	3.90	3.67	3.50	3.36	3.03	2.66	2.21
25	7.77	5.57	4.68	4.18	3.85	3.63	3.46	3.32	2.99	2.62	2.17
26	7.72	5.53	4.64	4.14	3.82	3.59	3.42	3.29	2.96	2.58	2.13
27	7.68	5.49	4.60	4.11	3.78	3.56	3.39	3.26	2.93	2.55	2.10
28	7.64	5.45	4.57	4.07	3.75	3.53	3.36	3.23	2.90	2.52	2.06
29	7.60	5.42	4.54	4.04	3.73	3.50	3.33	3.20	2.87	2.49	2.03
30	7.56	5.39	4.51	4.02	3.70	3.47	3.30	3.17	2.84	2.47	2.01
40	7.31	5.18	4.31	3.83	3.51	3.29	3.12	2.99	2.66	2.29	1.80
60	7.08	4.98	4.13	3.65	3.34	3.12	2.95	2.82	2.50	2.12	1.60
120	6.85	4.79	3.95	3.48	3.17	2.96	2.79	2.66	2.34	1.95	1.38
∞	6.63	4.61	3.78	3.32	3.02	2.80	2.64	2.51	2.18	1.79	1.00

注：表中的 n_1 是第一自由度(分子的自由度)；

n_2 是第二自由度(分母的自由度)；

λ 是临界值，$P\{F > \lambda\} = \alpha = 0.001$.

·随机数学卷·

第3篇

试验设计

编　者　项可风
审校者　汪仁官

目　录

引　　言

试验设计是研究如何正确地安排试验和分析数据的一门统计学科. 它的一些基本方法是由著名统计学家费希尔(R.A.Fisher)在1935年著的《试验设计》一书中提出来的. 当时这些方法主要用于农业、生物和医学试验.

在我国,对试验设计的应用,最先是由农业科学家从西方引进的,当时只限于农业田间试验. 20世纪50年代后期,在著名统计学家许宝騄(1910—1970)教授创导下,数学工作者才深入这个领域. 许教授亲自领导了一个试验设计讨论班,为国家培养了一批试验设计工作者. 30多年来,试验设计在我国得到了一定普及,特别是正交设计与三次设计,取得了相当多的应用成果.

就数学内容来说,试验设计包括组合设计与统计分析两部分. 因此,要求读者具有线性模型和组合分析两方面知识. 本篇力求从理论和应用的统一上,按试验的不同目的和类型,介绍这门学科的内容和方法.

1　引　　论

1.1　基本概念

"试验"是人类了解自然和社会规律的一项有计划有目标的实践活动. 衡量试验效果的量称为**试验指标**,简称指标,往后总用 η 表示. 有一类指标,如农业试验中的产量或工业试验中的某些物理性能等,可用一个数(或一组数)表示,这类指标称**数量指标**(或定量指标). 另有一类指标,不用数表示,而是按"质"分等,如产品质量(好、坏)、天气(晴、阴、雨)、颜色(深、浅)等等,这类指标称**定性指标**. 为了数据分析方便,对于定性指标,总是用一个(或多个)适当的数同它建立对应关系,将它转化为数量指标. 往后所讲的指标均指数量指标. 至于如何把一个定性指标转化为数量指标,这是一个复杂问题,本篇不讨论. 当指标要用一组数才能表示时,称这种问题为多指标问题. 多指标的分析方法是多元分析的内容(参见本书"多元统计分析"篇). 本篇只限于讨论单指标的统计分析问题.

由于试验过程中常常会出现各种人们难以预料的干扰,因此,试验总是存在误差. 在完成一项试验后,所得的指标值(试验结果),不是指标 η 的真值,而是带有误差的值. 由试验结果所得的指标值,称为**观测值**,它是含有误差的指标值. 往后总用 y 表示. $y-\eta=\epsilon$ 就称为**试验误差**,简称误差,往后总用 ϵ 表示.

$$y=\eta+\epsilon \tag{1-1}$$

称为数据结构式,其中 η 有时也叫(指标)真值.

在试验中,能得到的只能是观测值 y,真值 η 和误差 ϵ 是不能直接观测得到的.

数据分析的目的就是要通过 y 得到有关 η 和 ε 的信息.

当试验操作者改变试验的输入条件时,指标 η 也随着发生变化.影响指标取值的变量称为**因素**.因素可理解为试验中的自变量.如化学反应试验中的温度、压力、催化剂用量等;农业试验中的品种、肥料等.从广义上讲,因素还可理解为若干变量间的某种确定关系,如原料的配方、工艺流程和农业田间试验的管理措施等等,都可作为一种因素在试验中加以考察.如同指标一样,因素有可用数量表示的,如温度、压力等,称为数量因素;但也有不能用数量表示的,只能定性地描述,如农业试验中的作物品种,工业试验中使用的原料、工艺流程等,称为定性因素.在进行试验方案设计时,无须区别两类因素的差别.但在回归分析中,仅仅只须处理数量因素.

因素在试验中所处的状态,称为**因素的水平**.一般试验方案由若干个试验组成,因素在试验方案中变化了几种状态就称为几个水平.例如,在化学反应试验中,温度这个因素允许在一定范围内变化.此范围称为因素的试验区域.在试验时,总是选定在此范围内的几种温度状态下试验,譬如选取 80℃、85℃ 和 90℃ 三种状态下进行试验,80℃,85℃ 和 90℃ 都叫温度水平.在这个试验方案中,温度为三水平因素.

在试验中,有时因素所处状态是不能由试验操作者所控制的.如农作物品种试验中,生长期的日平均温度是一个重要因素,但在现有条件下,人们还无法控制它.试验中无法控制的因素称为**不可控因素**.而化学反应中的温度,在一般实验室条件下是可控的.试验中可控制的因素称为**可控因素**.

在试验的方案设计中,只对可控因素的水平变化作出规定.对不可控因素,只能在试验过程中记录其实际水平,而后用回归分析或协方差分析法加以处理.

1.2　试验的数学模型

根据影响指标的因素多少,可把试验分为单因素试验和多因素试验两类.用 $z_1, z_2, \cdots, z_m (m \geqslant 1)$ 表示试验中的 m 个因素.通常这 m 个因素的可能取值区域是 m 维欧氏空间的一个闭集.这个闭集称为试验域,记为 $\mathscr{D}$.指标 η 可看成是定义在 $\mathscr{D}$ 上的一个实值函数,

$$\eta = f(\boldsymbol{Z}), \tag{1-2}$$

其中 $\boldsymbol{Z} = (z_1, z_2, \cdots, z_m)^{\mathrm{T}}$.不过,这个函数的确切形式通常是未知的,但可根据试验本身或试验者的经验在对式(1-2)的函数形式给出种种假设的基础上得到.

假定从试验域中选取 n 个点,记第 i 点为 $\boldsymbol{Z}_i = (z_{i1}, z_{i2}, \cdots, z_{im})^{\mathrm{T}}$,则它是诸因素的水平组合,称为一个**处理**.若试验者只关心这 n 个处理的函数值 η_i,即

$$\eta_i = f(\boldsymbol{Z}_i) \qquad (i = 1, 2, \cdots, n), \tag{1-3}$$

试验的最终目的是要估计这 n 个函数值,并比较它们的大小,那么这样的试验称为**比较试验**.式(1-3)表示的模型称为一种方式分组模型,也称为单因素方差分析模型.在这里把处理看作因素,n 个处理点就是 n 个水平.

假定试验域 $\mathscr{D}$ 是一个连续域,即每个因素均为定量变量,那么,常常假定模型式(1-2)的函数可展开成如下形式:

$$\eta = \beta_1\varphi_1(\boldsymbol{Z}) + \beta_2\varphi_2(\boldsymbol{Z}) + \cdots + \beta_p\varphi_p(\boldsymbol{Z}), \tag{1-4}$$

其中 $\varphi_i(\boldsymbol{Z}), i = 1,2,\cdots,p$,是已知连续函数,而系数 $\beta_i, i = 1,2,\cdots,p$,是未知待定的.式(1-4)表示的模型,称为(线性)回归模型;β_i 称为回归系数;$\varphi_i(\boldsymbol{Z})$ 称为解释变量.如果试验的目的就是估计回归系数和选择合适解释变量,那么这样的试验设计称为**回归设计**.

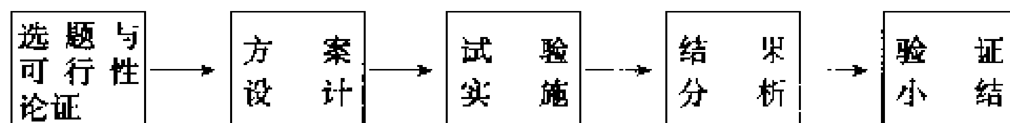
在多因素试验中,有时试验的目的不仅要估计模型函数,而且要分析因素水平的变化对指标 η 的影响敏感度,这样的试验称为**析因试验**.在式(1-4)中如果所有解释变量仅取0或1,那么这个模型称为析因试验模型,也叫多因素方差分析模型,系数 β 为因素的各种效应.

由于篇幅关系,本篇仅结合上面介绍的三种模型,讨论比较试验设计、析因试验设计和回归设计三种类型的设计问题.

1.3　设计试验的过程

"没有设计就不能施工."这是从工程建设中总结出来的规律,它同样适合于试验工作.

一般来说,做好一项试验工作,包含如下环节:



数理统计人员的主要工作是在方案设计和结果分析两个环节上.

在方案设计这一步,统计人员必须和专业人员一起决定要试验哪些因素和选择哪几个水平,要做多少次试验,选取哪些试验进行处理;要预计试验实施过程中可能会有哪些不可控因素和系统误差;要决定采用什么样的设计,用什么模型描述该项试验等.

在结果分析阶段,统计人员必须提供数据分析公式和计算程序;和专业人员一起,研究统计分析结果的专业解释,提出进一步验证试验方案和改进试验的意见.

大量实践经验表明,直接吸收统计工作者参加试验方案设计与结果分析,可提高试验效率,避免不必要的人力与物力浪费;同时能确保试验的可靠性和结果分析的科学性.

2　比较试验与区组设计

2.1　比较试验的数学描述

20世纪70年代初期,在我国著名数学家华罗庚(1910—1985)教授领导下,在全国推广了优选法——0.618试验法.这个试验法的数学依据是,假定在[0,1]区间

上,定义了一个下凸函数,则可通过试验最快地找到它的最小值.具体做法是:首先在[0,1]区间上取 $x_1 = 0.382, x_2 = 0.618$ 两点做试验,分别得到 y_1, y_2 两个函数值,然后比较它们的大小.若 $y_2 > y_1$,则砍掉区间$[x_2, 1]$,在$[0, x_2]$区间上,找出 x_1 的对称点 x_3,再在 x_3 点试验,得函数值 y_3,比较 y_1, y_3 的大小,砍掉区间$[x_3, x_1]$大值的一端.如此往复,逐步地缩短试验区间.可以证明该方法能用较少的试验次数找出最小值.这样的试验方法,简称为序贯的简单比较试验.这里所谓的"序贯",是指在做完一个试验并见到结果后才能决定下一个试验点.序贯试验只适合试验周期短的试验,而实际工作所研究的试验,试验周期一般都较长,如农业试验,这就要求把所有试验在一批中安排下去.这里所谓的"简单比较",是指试验没有误差,试验的观测值就是函数真值的情况下的比较.但是,在很多试验中都存在误差,这就要求试验要有重复,并且要经过严格统计检验才能判定函数值的大小.

在很多试验中,遇到的指标函数 $\eta(\boldsymbol{Z})$ 常常是多元的多峰函数,这就给"选优"带来更复杂的问题.统计的试验设计法在处理这类数学问题的方法是,首先将指标函数 $\eta(\boldsymbol{Z})$ 在试验域 $\mathscr{D}$ 上离散化;然后选择 n 个处理,记为 $\boldsymbol{Z}_1, \boldsymbol{Z}_2, \cdots, \boldsymbol{Z}_n$,相应的指标函数记为 $\eta_1 = f(\boldsymbol{Z}_1), \eta_2 = f(\boldsymbol{Z}_2), \cdots, \eta_n = f(\boldsymbol{Z}_n)$,并假定这 n 个处理点上的函数值基本上能反映出 $f(\boldsymbol{Z})$ 在 $\mathscr{D}$ 上的变化;经过试验估计出 n 个处理的指标值,最后比较它们的大小.这就把"选优"问题简化了.

例如,在一个面积为 10 000 m^2 的油田上,要寻找最厚油层,通常做法是每100 m^2 打一口探井,在 100 口探井打完后,找出油层最厚的那口探井.这口探井的最厚油层就认为是油田的最厚油层.

把一个连续问题化为离散问题,这是数理统计学中常用的基本方法.

在比较试验中,试验的目的不仅是要找出 n 个处理点上的最大值或最小值,而且还要求在指标达到某个界定值条件下,找出使生产成本最低的那些处理.因此,下面给出比较的一般数学定义.

设 $\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_n$ 是 n 个处理的真值.真值的一个对照(contrast),是指真值的一个线性函数

$$\varphi = c_1\eta_1 + c_2\eta_2 + \cdots + c_n\eta_n, \tag{2-1}$$

其中系数 $c_i, i = 1, 2, \cdots, n$,为给定的不全为零常数,满足条件

$$c_1 + c_2 + \cdots + c_n = 0. \tag{2-2}$$

特别地,取 $c_i = 1, c_j = -1$,其他均取 0,则

$$\varphi = \varphi_{ij} = \eta_i - \eta_j \qquad (i \neq j),$$

φ_{ij} 称为第 i, j 处理的一个对照.设 $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_k$ 是 k 个对照,若不存在一组不全为零常数 $a_1, a_2, \cdots, a_k$,使

$$a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 + \cdots + a_k\varphi_k = 0, \tag{2-3}$$

则称这 k 个对照是独立的.显然,可以证明,最大独立对照的个数 $k = n - 1$.一般地,选定 $n - 1$ 个独立对照作为基,任意一个对照均可用这组基表示.若两个线性函数的系数向量内积为零,则称这两个线性函数是正交的.

线性函数

$$\mu = \frac{\eta_1 + \eta_2 + \cdots + \eta_n}{n} \qquad (2\text{-}4)$$

称为均值.显然它不是一个对照,但它与任何对照都正交.对于任何处理真值 η_k,

$$\alpha_k = \eta_k - \mu \qquad (k = 1,2,\cdots,n) \qquad (2\text{-}5)$$

也是线性函数,并且还是一个对照.下面称它为第 k 个**处理效应**. n 个处理效应是不独立的,它满足约束条件

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \cdots + \alpha_n = 0. \qquad (2\text{-}6)$$

独立的处理效应只有 $n-1$ 个.有时也把式(2-6)称为**边界条件**.

由式(2-5),可将每个处理真值表示为

$$\eta_k = \mu + \alpha_k. \qquad (2\text{-}7)$$

当试验存在系统误差,即每个观测值均增加(或减少)一个未知常数时,得不到 η_k 的无偏估计;但 α_k 的估计不受影响,即处理间的对照是不变的.式(2-7)也叫做一种方式分组的方差分析模型.

2.2 试验单元与区组

安排处理的一次试验,要涉及许多外界条件,如场地、设备、材料、操作人员素质和时空等等.除处理本身所涉及的诸多因素外,试验全过程中所涉及的外部条件的综合,构成一个**试验单元**.从一次试验的试验单元到另一次试验的试验单元,其综合条件可能不变,也可能改变.试验单元条件的改变,会造成试验观察值的系统误差.在一项大型试验中,需要许多试验单元来安排试验的实施,这时就很难做到使所有试验单元的条件保持一致.

例如,一项大型的农业品种试验,需在若干试验田中进行.由于各试验田的土壤条件的不一致及管理水平的差异,很难做到试验单元的一致性.这种不一致性,会给试验结果带来系统误差.若试验设计不合理,则会导致整个试验的失败.

当试验单元的综合条件不能完全保持一致时,必须将全部试验单元进行划分,将条件一致的试验单元划在一组,称为**区组**.区组中所含的单元数,称为区组大小.区组与区组之间的试验单元允许存在差别.试验的系统误差的变化在区组之间发生,而区组内部的试验单元间具有同一系统误差.区组的系统误差叫做**区组效应**.

具体到一项试验,如何将试验单元划分成若干区组?这需要将专业知识与统计技巧相结合,一般很难给出通用的准则.现用一个农业田间试验例子加以说明.假定有5个花生品种要进行比较试验,试验田总面积为0.5hm^2,选择在南北向有一定倾斜的坡地上,要求每个品种占地0.1hm^2.那么,如何划分试验单元呢?

大家知道,由于倾斜会造成土壤肥力差异,不同高程的光照与透风程度也有差别,这都可能影响花生产量.图2-1所示,将试验田按东西向划分成5块,那么这5个试验单元之间差异较大,若用它来安排比较试验,显然是得不出任何结论的.图2-2所示的是按南北方向划分5个试验单元,虽然这时单元间的差别消除了,但在5个单元上做5个品种试验,没有重复试验,得不到随机误差的估计,只能做一些简单的比较.更科学合理的划分,应按图2-3所示的进行,将试验田划分成10块,每块

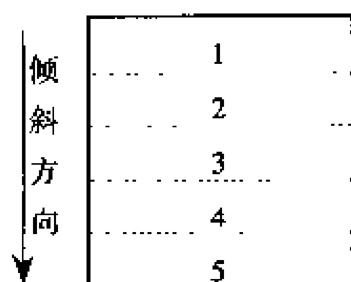


图 2-1

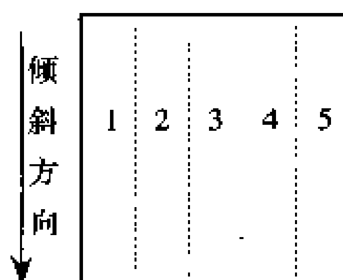


图 2-2

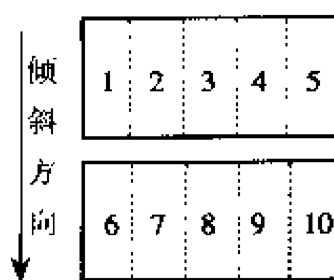


图 2-3

0.05 hm², 1 ~ 5 号组成一个区组, 6 ~ 10 是另一个区组. 尽管区组间的试验单元间存在差别, 但区组内的 5 个单元是一致的. 这时, 可将 5 个品种随机地安排在第一区组中各做一次试验, 在第二区组中各做一次重复试验. 这样就可获得随机误差的估计, 可对品种间的各种对照进行统计检验. 这个设计就是下面将要介绍的随机化完全区组设计.

2.3 完全区组设计

费希尔在他早期的著作中, 曾提出试验设计的三项原则: 局部控制、重复与随机化. 这三项原则至今依然为试验设计者所遵守. 所谓局部控制, 就是将试验单元按相似性划分成若干区组, 用以减少系统误差的干扰; 所谓重复, 就是对每个处理要进行若干次重复试验, 用以估计试验的随机误差, 以使检验结果的可重复性和再现性; 所谓随机化, 就是把处理安排到试验单元时, 要用随机化方法, 这样可避免人为的"主观误差".

假定要比较 n 个处理, 要求每个处理重复试验 $R(R > 1)$ 次. 这样, 需要做 $N = Rn$ 次试验, 要准备 N 个试验单元. 所谓**随机化完全区组**设计, 就是将 N 个试验单元划分成 R 个区组, 每区组包含 n 个单元; 然后将 n 个处理用随机化法安排到同一区组中进行试验, 在 R 个区组中重复 R 次试验. "随机化完全区组设计" 中所谓的"随机" 是指把处理排列到区组中去时采用随机抽取法; 所谓的"完全" 是指区组大小等于处理数. 随机完全区组是最简单的设计法, 试验结果的分析也很简单.

用 y_{ij} 表第 i 个处理在第 j 个区组的试验观测值, 其数据结构模式为

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ij} \qquad (i = 1,2,\cdots,n, j = 1,2,\cdots,R), \qquad (2\text{-}8)$$

其中, α_i 为第 i 个处理效应; β_j 为第 j 个区组效应, 它们均满足边界条件. 式(2-8) 是方差分析中的两种方式分组的可加效应模型.

记

$$T = \text{所有观测值之和} = \sum_i \sum_j y_{ij},$$

$$T_{i\cdot} = \text{第 } i \text{ 处的观测之和} = \sum_j y_{ij} \qquad (i = 1,2,\cdots,n), \qquad (2\text{-}9)$$

$$T_{\cdot j} = \text{第 } j \text{ 区组的观测值之和} = \sum_i y_{ij} \qquad (j = 1,2,\cdots,R).$$

诸参数的 L.S.(最小二乘) 估计为

$$\hat{\mu} = \frac{T}{N} = y_{..},$$

$$\hat{\alpha}_i = \frac{T_{i.}}{R} - \frac{T}{N} = y_{i.} - y_{..} \qquad (i = 1,2,\cdots,n),$$

$$\hat{\beta}_j = \frac{T_{.j}}{n} - \frac{T}{N} = y_{.j} - y_{..} \qquad (j = 1,2,\cdots,R).$$

所有观测值围绕平均值上、下波动.这可用

$$SS_T = \sum_i \sum_j (y_{ij} - y_{..})^2 = \sum_i \sum_j y_{ij}^2 - \frac{T^2}{N} \tag{2-10}$$

来表示,SS_T 称为总平方和.由于总的波动源于多种原因.由式(2-8)模型结构可看到,波动的主要来源有三个方面:(1)处理的不同;(2)区组间的差别;(3)试验的随机误差.分别反映上面三项的平方和为

$$\begin{cases} SS_A = \text{处理平方和} = R\sum_i \hat{\alpha}_i^2 = \sum_i \frac{T_{i.}^2}{R} - \frac{T^2}{N}, \\ SS_B = \text{区组平方和} = n\sum_j \hat{\beta}_j^2 = \sum_j \frac{T_{.j}^2}{n} - \frac{T^2}{n}, \\ SS_e = \text{误差平方和} = \sum_i \sum_j \hat{\varepsilon}_{ij}^2 = \sum_i \sum_j y_{ij}^2 - \sum_i \frac{T_{i.}^2}{R} - \sum_j \frac{T_{.j}^2}{n} + \frac{T^2}{N}. \end{cases} \tag{2-11}$$

由式(2-11),可直接得到恒等式

$$SS_T = SS_A + SS_B + SS_e. \tag{2-12}$$

上式称为平方和分解式.它将总的波动平方和,根据其来源做一一的分解.所谓方差分析,实质上是一种平方和分解技术.必须指出,不是所有的试验设计都能将总平方和分解成模型中各单项平方和之和.具有类似式(2-12)分解式的试验设计称为正交设计.所以,完全区组设计是一种正交设计.关于进一步的数据分析,读者可参看文献[1].

2.4　平衡不完全区组设计

在完全区组设计中,要求区组的大小等于处理数,但在很多试验中,由于处理数很大,很难做到在一个区组中保持试验单元的一致性.这时要求把区组划分得小一些.区组大小小于处理数时的区组,称为**不完全区组**.

假定有 b 个大小为 k 的区组,安排 n 个处理进行试验,要求:

(1) 任一处理在同一区组中最多出现一次(可以不出现);

(2) 每个处理在 R 个区组中重复试验;

(3) 任何一对处理,同时出现在 λ 个区组中.

满足以上条件的设计,称为**平衡不完全区组设计**,简记为BIBD.这里 n,R,b,k 和 λ 称为设计参数.它们自然要满足下面条件:

1° $nR = bk$;

$2°\ \lambda(n-1) = R(k-1)$;

$3°\ b \geqslant n$.

其中1°,2°二式,可直接从定义中推出;3°虽然不是很明显,但引进设计的矩阵表示后证明就很简单了.当 $b = n$ 时的区组,称为**对称平衡不完全区组**,简记为SBIB.

为了数学叙述方便,常用 $n \times b$ 阶的关联阵 $\boldsymbol{D} = [\delta_{ij}]$ 表示一个区组设计,行号代表处理,列号表示区组.若第 i 个处理被安排在第 j 个区组中,则 $\delta_{ij} = 1$,不然 $\delta_{ij} = 0$.

例如,用1,2,…,7代表7个处理,区组设计为

$$(1,2,3);\ (1,4,5);\ (1,6,7);\ (2,4,6);$$
$$(2,5,7);\ (3,4,7);\ (3,5,6),$$

其中括号中的三个数表示在同一区组中的3个处理.该区组设计总共有7个区组.不难直接验证,它是一个对称平衡不完全区组设计,简记为SBIBD,设计参数为 $n = b = 7, R = k = 3, \lambda = 1$.用设计矩阵可表示为

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

由BIBD的定义可推得,BIBD的设计矩阵 $\boldsymbol{D}$ 满足

$1°\ \boldsymbol{D}\mathbf{1}_b = R\mathbf{1}_n$,即行和为 R;

$2°\ \boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\mathbf{1}_n = k\mathbf{1}_b$,即列和为 k;

$$3°\ \boldsymbol{D}\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} R & \lambda & \cdots & \lambda \\ \lambda & R & \cdots & \lambda \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \lambda & \lambda & \cdots & R \end{bmatrix} = (R-\lambda)\boldsymbol{I}_n + \lambda\boldsymbol{J}_n.$$

即每个处理重复 R 次,任两个处理必在 λ 个区组中相遇.上式中 $\mathbf{1}_n$ 表元素为1的 n 阶向量;$\boldsymbol{I}_n$ 为 n 阶单位矩阵;$\boldsymbol{J}_n$ 为元素全为1的矩阵.若一个以0,1为元素的矩阵,满足上面3条,则就给出一个BIBD.

若记 $\overline{\boldsymbol{D}} = \boldsymbol{J}_{n\times b} - \boldsymbol{D}$,即将设计矩阵 $\boldsymbol{D}$ 中的0,1值互换,不难证明它也是一个BIBD.其设计参数为 $n, b, \bar{k} = n - k, \bar{R} = b - R, \bar{\lambda} = b - 2R + \lambda$.$\overline{\boldsymbol{D}}$ 称为 $\boldsymbol{D}$ 的互补设计.因此,给定 n 与 b 后,若BIBD存在,则总可从 $\boldsymbol{D}$ 或 $\overline{\boldsymbol{D}}$ 中选择一个试验总数小于 $nb/2$ 的设计.

关于BIBD的构造问题,涉及许多组合数学问题,本篇不再深入介绍.一些常用的BIBD,读者可从文献[3]中查到.

BIBD试验的数据结构模式与式(2-8)同,但 y_{ij} 只定义在设计矩阵 $\boldsymbol{D}$ 的元素 $\delta_{ij} = 1$ 上,$\delta_{ij} = 0$ 上无值,因此可把模型表示为

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ij} \qquad (\delta_{ij} = 1). \tag{2-13}$$

这是二种方式分组的不完全试验的可加效应模型,其参数的 L.S.估计为

$$\hat{\mu}=\frac{T}{nR},$$

$$\hat{\alpha}_i=\left(\frac{k}{\lambda n}\right)A_i \qquad (i=1,2,\cdots,n),$$

$$\hat{\beta}_j=\frac{1}{k}\left(T_{\cdot j}-\sum_{i=1}^{n}\delta_{ij}\hat{\alpha}_i\right)-\frac{T}{nR} \qquad (j=1,2,\cdots,b),$$

其中 $A_i=T_{i\cdot}-\sum_{j=1}^{b}\delta_{ij}T_{\cdot j}/k$,其余记号与式(2-9)同.各种平方和公式为

$$SS_T=\sum_{\delta_{ij}=1}y_{ij}^2-\frac{T^2}{nR},$$

$$SS_A=\left(\frac{k}{\lambda n}\right)\sum_{i=1}^{n}A_i^2,$$

$$SS_{B(A)}=\text{未扣除处理的区组平方和}=\sum_{j=1}^{b}\frac{T_{\cdot j}^2}{k}-\frac{T^2}{nR},$$

$$SS_e=SS_T-SS_A-SS_{B(A)}.$$

要特别指出的是,$SS_{B(A)}$ 不完全反映区组变化在总平方和 SS_T 中的份额,其中混有处理的影响.而"纯粹"反映区组的平方和为

$$SS_B=SS_A+\sum_{j=1}^{b}\frac{T_{\cdot j}^2}{k}-\sum_{i=1}^{n}\frac{T_{i\cdot}^2}{R}.$$

这时总平方分解式式(2-12)不成立,所以 BIBD 是一种非正交设计.

2.5 部分平衡不完全区组设计

在 BIBD 中,要求任何两个处理在同一区组中相遇同样的次数 λ.这一排列组合上的要求,增加了许多试验工作量.例如,有 8 个处理,要在区组大小 $k=3$ 中实现 BIBD,其试验重复数 R 至少要 21 次.没有必要的大量重复,常常造成人力物力的浪费;因此博斯(R.C.Bose)(1939 年)将 BIBD 定义的均衡条件放宽,引进了**部分平衡不完全区组设计**(PBIBD).

在定义 PBIBD 之前,先要引进结合方案的概念.

用 S 表示由 n 个处理组成的集合,对于任意处理 $\theta\in S$,把 S 中余下的 $n-1$ 个处理划分成 m 个不相交的子集,记为 $S(\theta,1),S(\theta,2),\cdots,S(\theta,m)$.若处理 $\varphi\in S(\theta,i)$,则称 φ 与 θ 是第 i 结合关系,而 $S(\theta,i)$ 为 θ 的第 i 结合类.换言之,$S(\theta,i)$ 为与 θ 成第 i 结合的所有处理的集合.假若下面条件满足:

1° 与任意 $\theta\in S$ 为第 i 结合的处理数 $n_i(i=1,2,\cdots,m)$ 不依赖于 θ;

2° 若 θ 与 φ 为第 r 结合,则与 θ 为第 i 结合,与 φ 为第 j 结合的处理数 p_{ij}^r,也不依赖 θ 与 φ,

则称在 S 上定义了 m 个**结合关系**.$n_i(i=1,2,\cdots,m)$ 及 $p_{ij}^r(r,i,j=1,2,\cdots,m)$ 称为结合参数.

例如，设 $S=\{1,2,3,4,5,6,7,8,9\}$，它由 $n=9$ 个处理组成，则分成两个结合类的结合关系可由表 2-1 定义.

表 2-1　结合方案表

θ	$S(\theta,1)$						$S(\theta,2)$	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
2	1	3	4	5	8	9	6	7
3	1	2	6	7	8	9	4	5
4	1	2	6	7	8	9	3	5
5	1	2	6	7	8	9	3	4
6	1	3	4	5	8	9	2	7
7	1	3	4	5	8	9	2	6
8	2	3	4	5	6	7	1	9
9	2	3	4	5	6	7	1	8

其结合参数为：$n_1=6, n_2=2; p_{11}^1=3, p_{22}^1=0, p_{12}^1=p_{21}^1=2; p_{11}^2=6, p_{22}^2=1, p_{12}^2=p_{21}^2=0$.

假定 n 个处理，已经定义了 m 个结合关系，将它们排列到大小为 k 的 b 个区组中，要求：

(1) 每个处理在同一区组中最多出现一次；

(2) 每个处理在 R 个不同区组中重复；

(3) 任何一对第 i 结合的处理，在 $\lambda_i(i=1,2,\cdots,m)$ 个区组中相遇.

那么，满足以上条件的区组设计称为部分平衡不完全区组设计，简记为 PBIBD. 当 $\lambda_1=\lambda_2=\cdots=\lambda_m$ 时，PBIBD 退化为 BIBD. 所以 PBIBD 是 BIBD 的推广.

例如，由表 2-1 定义的结合方案，其中的9个处理可按下列方法排列到大小为 $k=3, b=9$ 的区组中：

$$(1,2,3);\quad (1,6,4);\quad (1,7,5);$$
$$(6,8,3);\quad (6,9,5);\quad (7,8,4);$$
$$(7,9,3);\quad (2,8,5);\quad (2,9,4).$$

其中 $R=3, \lambda_1=1, \lambda_2=0$.

也可以用设计矩阵 $\boldsymbol{D}$ 来表示上面的设计. 但 $\boldsymbol{DD}^{\mathrm{T}}$ 的非对角元素将出现 m 个不同的 λ.

PBIBD 的数据结构模式与式(2-12)同. 但参数的 L.S. 估计与平方和分解式更复杂一些，这里就不给出了，请读者参看文献[1].

2.6　两向区组设计

前面所讨论的区组设计问题，都假定区组内部试验单元的综合条件是一致的，条件的改变只在区组之间发生. 这样的区组叫做单向区组. 但在有些实际问题中，区组内部的单元之间也有变化. 例如，某化工试验，须做 12 次试验来完成，一批原料只能供 3 次试验，而各批原料在纯度上又有差异. 为此，需把一批原料作为一

个区组，区组大小为3单元.这样需用4批原料.由于原料有挥发性，打开包装后要很快用完，因此，必须用3台仪器设备平行进行试验.考虑到设备与操作工人的技术等因素的差别，也应该将它们划为区组，这种两个方向划分区组的方法叫做两向分组，一向为行区组，另一向为列区组，如图2-4所示.这是一种二维区组划分法.类似地，可以有多维区组.下面仅仅介绍两种常用的两向区组设计.

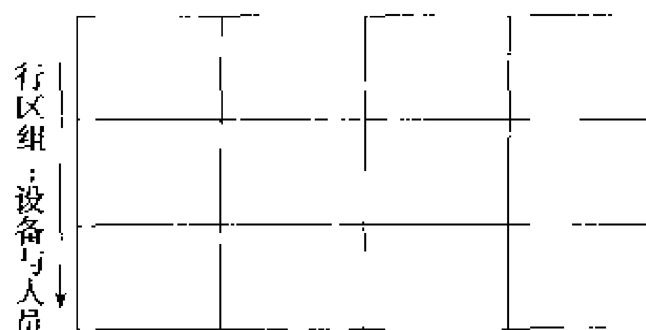


图2-4

2.6.1　拉丁方区组设计

假定有 n 个处理，要在两向区组中进行比较试验.首先，按变化着的两个方向将试验划分成 $n \times n$ 个试验单元.即将 n^2 个单元分成 n 个行区组和 n 个列区组.所谓**拉丁(Latin)方区组设计**，就是随机地将 n 个处理，安排到 $n \times n$ 个两向区组中去，要求每行每列每个处理都出现一次，也就是每行每列都构成完全区组，每个处理重复 n 次.

例如，假定有4个作物品种，要在一块从南到北、从东到西土壤肥力均有变化的试验田中进行试验.为了不使土壤肥力的差异造成试验失败，最好的设计方法是将试验田按土壤肥力变化的两个方向，划分成4行4列共16个单元，如图2-5所示.将品种随机排进单元.图中数码代表作物品种号.试验田四周，日照和通风条件较好，同时也易遭人畜损害，一般需设立隔离的保护区，种上类同的作物品种.

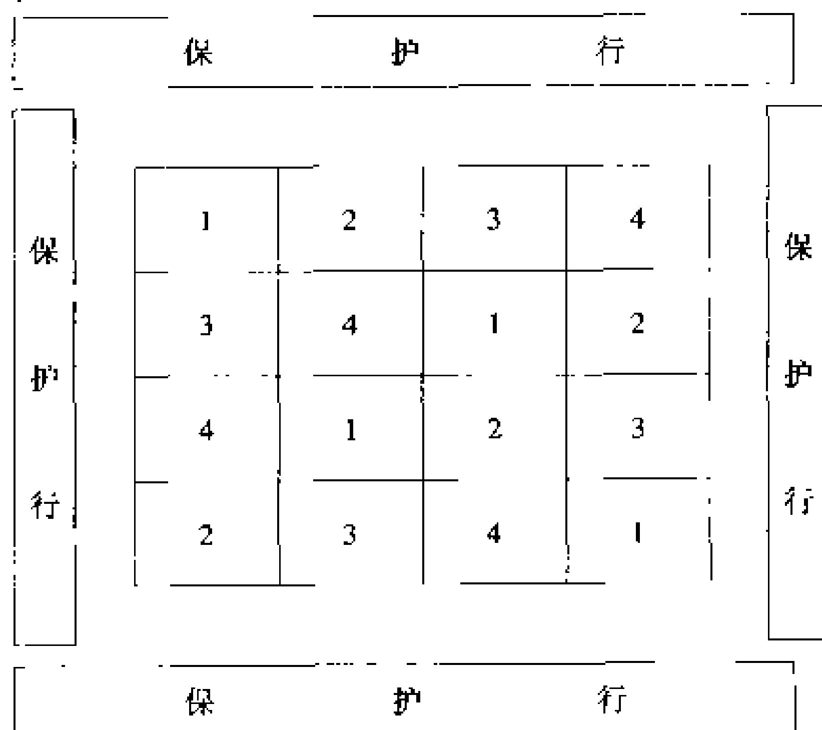


图2-5

用 $y_{ij}(k)$ 表示第 i 行第 j 列单元上的第 k 个处理的试验观测值.数据的结构模型为

$$y_{ij}(k) = \mu + \alpha_k + \beta_i + \gamma_j + \epsilon_{ij} \qquad (i = 1,2,\cdots,n, j = 1,2,\cdots,n), \tag{2-14}$$

其中 α_k 为安排在第 i 行第 j 列单元中的处理效应;β_i 为第 i 行效应;γ_j 为第 j 列效应.拉丁方区组设计是一种正交设计,其数据分析方法同于 $L_{n^2}(n^3)$ 型正交表设计,这里就不再介绍.

2.6.2 尧丁方区组设计

在拉丁方区组设计中,它的每行和每列都是一个完全区组,因此,每个处理要重复 n 次.过多重复会带来试验的人力与物力的浪费.譬如,若将拉丁方区组除去一行,留下 $(n-1)\times n$ 个单元,对行来说依然是 $n-1$ 个完全区组;但对列来说,构成一个具有参数 $n = b, k = R = n-1, \lambda = n-2$ 的 SBIBD.

一般地,所谓**尧丁(Youden)方区组设计**,就是将 n 个处理排列到 $R\times n$ 的两向区组中去,使得在 R 个行区组为完全区组,而 n 个列区组组成 SBIB.

例如,$R\times n = 3\times 7$ 的两向区组如下:

1	2	3	4	5	6	7
2	3	4	5	6	7	1
4	5	6	7	1	2	3

它就是一个尧丁方设计,其行是完全区组,7个处理均出现一次;而其7个列组成参数为 $n = b = 7, k = R = 3, \lambda = 1$ 的 SBIB.

一般地,可以证明,任意一个 SBIB 设计,总可适当调整区组中处理位置,使其成为 $R\times n$ 的尧丁方区组设计.换句话说,尧丁方区组的构造问题是与 SBIB 构造等价的;然而尧丁方区组设计是两向区组设计.

尧丁方区组设计的试验观测值的数据结构式与拉丁方模型式(2-14)同.由设计可看到,尧丁方区组设计的行效应与处理效应和列效应均正交,但处理效应与列效应不正交.尧丁方区组设计是部分正交设计.各效应的 L.S.估计为:

$$\hat{\mu} = \frac{T}{nR}; \qquad \hat{\alpha}_k = \left(\frac{R}{\lambda n}\right)A_k \qquad (k = 1,2,\cdots,n);$$

$$\hat{\beta}_i = \frac{T_{i\cdot}}{k} - \frac{T}{nR} \qquad (i = 1,2,\cdots,R);$$

$$\hat{\gamma}_j = \left(\frac{R}{\lambda n}\right)B_j \qquad (j = 1,2,\cdots,n),$$

其中 $A_k = T_{(k)} - \sum_{(k)} T_{\cdot j}/R$, $B_j = T_{\cdot j} - \sum_{(j)} T_{(k)}$, $\sum_{(k)}$ 为包括处理 k 的列区组 $T_{\cdot j}$ 之和,$\sum_{(j)}$ 为第 j 区组中的处理 $T_{(k)}$ 之和.

各种平方和分别为

$$SS_\alpha = (\frac{R}{\lambda n})\sum_{k=1}^{n} A_k{}^2; \quad SS_\gamma = (\frac{R}{\lambda n})\sum_{j=1}^{n} B_j{}^2;$$

$$SS_\beta = \sum_{i=1}^{R} \frac{T_{i\cdot}{}^2}{n} - \frac{T}{Rn}; \quad SS_{\gamma(\alpha)} = \sum_{j=1}^{n} \frac{T_{\cdot j}{}^2}{R} - \frac{T^2}{Rn};$$

$$SS_e = SS_T - SS_\beta - SS_\alpha - SS_{\gamma(\alpha)}.$$

这样就可给出方差分析表.

3 多因素析因试验

3.1 指标函数按效应的展开式

多因素析因试验的主要目的是弄清每个因素对指标函数的影响和各个因素同时变化对指标函数的影响.为了解释每个因素对指标函数的影响,通常根据设计,将指标函数展开成各种效应函数之和.

一般地,一个试验的设计,相当于在试验区域$\mathscr{D}$上定义了一个测度.于是,可把m个因素$\boldsymbol{Z} = (z_1, z_2, \cdots, z_m)^T$看作$m$维随机向量,指标函数$\eta(\boldsymbol{Z})$也就成一维随机变量.

记$\boldsymbol{Z}_\alpha = (z_{i_1}, z_{i_2}, \cdots, z_{i_\alpha})^T$为$\boldsymbol{Z}$的一个$\alpha$维分量,$1 \leqslant i_1 < i_2 < \cdots < i_\alpha \leqslant m$,则$\boldsymbol{Z}_\alpha$是$\boldsymbol{Z}$的一个子集,借用集合符号有$\boldsymbol{Z}_\alpha \subset \boldsymbol{Z}$.当$\alpha = 0$时,定义$\boldsymbol{Z}_\alpha$为空集;当$\alpha = m$时,$\boldsymbol{Z}_m = \boldsymbol{Z}$.

假定对于给定的$\boldsymbol{Z}_\alpha$,$\eta(\boldsymbol{Z})$的条件期望存在,记为

$$M(\boldsymbol{Z}_\alpha) = E(\eta(\boldsymbol{Z}) \mid \boldsymbol{Z}_\alpha).$$

当$\alpha = 0$时,记

$$M(\boldsymbol{Z}_0) = \mu = E(\eta(\boldsymbol{Z})).$$

定义**α-1 阶交互效应**(函数)为

$$\mu(\boldsymbol{Z}_\alpha) = \sum_{\beta=0}^{\alpha}(-1)^{\alpha-\beta}\sum_{\boldsymbol{Z}_\beta \subset \boldsymbol{Z}_\alpha} M(\boldsymbol{Z}_\beta), \tag{3-1}$$

其中$\sum_{\boldsymbol{Z}_\beta \subset \boldsymbol{Z}_\alpha}$表示对$\boldsymbol{Z}_\alpha$中所有一切含$\beta$个分量子集求和,共有$\binom{\alpha}{\beta}$个项.例如,当$\alpha = 1$,$Z_1 = (z_{i_1})$时,式(3-1)为

$$\mu(z_{i_1}) = M(z_{i_1}) - M(Z_0) = M(z_{i_1}) - \mu, \tag{3-2}$$

它是因素z_{i_1}的0阶交互效应.通常0阶交互效应称为**主效应**.当$\alpha = 2$,$\boldsymbol{Z}_2 = (z_{i_1} z_{i_2})^T$时,式(3-1)为

$$\mu(z_{i_1},z_{i_2}) = M(z_{i_1},z_{i_2}) - M(z_{i_1}) - M(z_{i_2}) + \mu, \tag{3-3}$$

它是因素(z_{i_1},z_{i_2})的1阶交互效应,通常简称为z_{i_1}与z_{i_2}的交互效应.由式(3-2)、式(3-3)可以看到,

$$M(z_{i_1}) = \mu + \mu(z_{i_1}),$$

$$M(z_{i_1},z_{i_2}) = \mu + \mu(z_{i_1}) + \mu(z_{i_2}) + \mu(z_{i_1},z_{i_2}).$$

可用归纳法证明:

$$M(\mathbf{Z}_\alpha) = \sum_{\beta=0}^{\alpha}\sum_{\mathbf{Z}_\beta\subset\mathbf{Z}_\alpha}\mu(\mathbf{Z}_\beta). \tag{3-4}$$

也就是说,$\mathbf{Z}_\alpha$的条件期望$M(\mathbf{Z}_\alpha)$,可展成$\mathbf{Z}_\alpha$的所有子集变量的交互效应之和.特别地,当$\alpha = m$时,

$$\eta(\mathbf{Z}) = \sum_{\beta=0}^{m}\sum_{\mathbf{Z}_\beta\subset\mathbf{Z}}\mu(\mathbf{Z}_\beta). \tag{3-5}$$

这就是指标函数按效应的展开式.

例1 设$\eta(\mathbf{Z}) = z_1z_2$.若设计是单位正方形上的均匀分布,则

$$E(\eta(2)) = \frac{1}{4},$$

$$M(z_1) = \frac{1}{2}z_1,\quad M(z_2) = \frac{1}{2}z_2,$$

$$\mu(z_1) = \frac{1}{2}\left(z_1 - \frac{1}{2}\right),\quad \mu(z_2) = \frac{1}{2}\left(z_2 - \frac{1}{2}\right),$$

$$\mu(z_1,z_2) = \left(z_1 - \frac{1}{2}\right)\left(z_2 - \frac{1}{2}\right).$$

按效应的展开式为

$$\eta(\mathbf{Z}) = \frac{1}{4} + \frac{1}{2}\left(z_1 - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\left(z_2 - \frac{1}{2}\right) + \left(z_1 - \frac{1}{2}\right)\left(z_2 - \frac{1}{2}\right). \tag{3-6}$$

若设计为二元正态分布

$$N_2\left(\begin{bmatrix}\mu_1\\ \mu_2\end{bmatrix},\begin{bmatrix}\sigma_1^2 & 0\\ 0 & \sigma_2^2\end{bmatrix}\right),$$

则其展开式为

$$\eta(\mathbf{Z}) = \mu_1\mu_2 + \mu_2(z_1 - \mu_1) + \mu_1(z_2 - \mu_2) + (z_1 - \mu_1)(z_2 - \mu_2). \tag{3-7}$$

从上式可看到,同一模型函数在不同设计下,其展开形式是不同的.下面主要讨论正交展开问题.

3.2 正交设计与方差分解

在例1中,所给出的两种设计的分量都是独立的.一般地,使$\mathbf{Z}$的各分量相互独立的设计,称为**正交设计**,对于正交设计,指标函数的展开式中各效应具有如下重要性质.

1° $$E_{Z_\beta}(\mu(\boldsymbol{Z}_\alpha)) = 0 \qquad (\forall \boldsymbol{Z}_\beta \in \boldsymbol{Z}_\alpha). \tag{3-8}$$

其中 E_{Z_β} 表示对分量 $\boldsymbol{Z}_\beta$ 求期望.证明略.式(3-8)也叫做效应的边界条件.

2° 若 $\boldsymbol{Z}_\alpha \neq \boldsymbol{Z}_\beta$,则

$$\operatorname{cov}(\mu(\boldsymbol{Z}_\alpha), \mu(\boldsymbol{Z}_\beta)) = 0, \tag{3-9}$$

即不同因素间的交互效应是无关的.由此可直接得到下面的方差分解式.

3° $$\operatorname{var}(\eta(\boldsymbol{Z})) = \sum_{\alpha=1}^{m} \sum_{\boldsymbol{Z}_\alpha \subset \boldsymbol{Z}} \operatorname{var}(\mu(\boldsymbol{Z}_\alpha)). \tag{3-10}$$

这表明,正交设计把指标函数总方差分解为各效应的方差和.

可以直接验证,例1的两种设计中式(3-8)~式(3-10)均成立.下面再举一个离散正交设计例子来验证.

例 2 设 $m = 3, \boldsymbol{Z} = (z_1, z_2, z_3)^{\mathrm{T}}$ 的取值域为 $t_1 \times t_2 \times t_3$ 的三维网格点,$\eta(\boldsymbol{Z})$ 为定义在网格点上的离散函数.记 $\eta_{ijk} = \eta(z_1 = i, z_2 = j, z_3 = k), i = 1,2,\cdots,t_1$, $j = 1,2,\cdots,t_2, k = 1,2,\cdots,t_3$.记 $p_i^{(r)} = P(z_r = i)(r = 1,2,3, i = 1,2,\cdots,t_r)$ 为设计的边际概率,第(i,j,k)网点上的设计概率为 $p_i^{(1)}p_j^{(2)}p_k^{(3)}$.

显然这是一个正交设计.特别地,当 $p_i^{(r)} = 1/t_r$ 时,这是一个网格点上的等概率设计,通常称之为等重复的全面试验.所以等重复全面试验是一种正交设计.

下面给出它的方差分解式.由定义,有

$$E(\eta(\boldsymbol{Z})) = \sum_i \sum_j \sum_k p_i^{(1)} p_j^{(2)} p_k^{(3)} \eta_{ijk} \stackrel{\text{def}}{=\!=} \eta_{\cdots},$$

$$M(z_1 = i) = \sum_j \sum_k p_j^{(2)} p_k^{(3)} \eta_{ijk} \stackrel{\text{def}}{=\!=} \eta_{i\cdot\cdot},$$

$$M(z_2 = j) = \sum_i \sum_k p_i^{(1)} p_k^{(3)} \eta_{ijk} \stackrel{\text{def}}{=\!=} \eta_{\cdot j\cdot},$$

$$M(z_3 = k) = \sum_i \sum_j p_i^{(1)} p_j^{(2)} \eta_{ijk} \stackrel{\text{def}}{=\!=} \eta_{\cdot\cdot k},$$

$$M(z_1 = i, z_2 = j) = \sum_k p_k^{(3)} \eta_{ijk} \stackrel{\text{def}}{=\!=} \eta_{ij\cdot},$$

$$M(z_1 = i, z_3 = k) = \sum_j p_j^{(2)} \eta_{ijk} \stackrel{\text{def}}{=\!=} \eta_{i\cdot k},$$

$$M(z_2 = j, z_3 = k) = \sum_i p_i^{(1)} \eta_{ijk} \stackrel{\text{def}}{=\!=} \eta_{\cdot jk},$$

于是各效应为

$$\mu(z_1 = i) = \eta_{i\cdot\cdot} - \eta_{\cdots},$$

$$\mu(z_2 = j) = \eta_{\cdot j\cdot} - \eta_{\cdots},$$

$$\mu(z_3 = k) = \eta_{\cdot\cdot k} - \eta_{\cdots},$$

$$\mu(z_1 = i, z_2 = j) = \eta_{ij\cdot} - \eta_{i\cdot\cdot} - \eta_{\cdot j\cdot} + \eta_{\cdots},$$

$$\mu(z_1 = i, z_3 = k) = \eta_{i\cdot k} - \eta_{i\cdot\cdot} - \eta_{\cdot\cdot k} + \eta_{\cdots},$$

$$\mu(z_2=j,z_3=k)=\eta_{.jk}-\eta_{.j.}-\eta_{..k}+\eta_{...},$$

$$\mu(z_1=i,z_2=j,z_3=k)=\eta_{ijk}-\eta_{ij.}-\eta_{i.k}+\eta_{.jk}-\eta_{i..}+\eta_{.j.}+\eta_{..k}-\eta_{...}.$$

显然,各效应满足边界条件和协方差为零的条件.

方差分解式为

$$\begin{aligned}
\operatorname{var}(\eta(\mathbf{Z})) &= \sum_i\sum_j\sum_k p_i^{(1)}p_j^{(2)}p_k^{(3)}(\eta_{ijk}-\eta_{...})^2 \\
&= \sum_i\sum_j\sum_k p_i^{(1)}p_j^{(2)}p_k^{(3)}((\eta_{ijk}-\eta_{ij.}-\eta_{i.k}-\eta_{.jk}+\eta_{i..}+\eta_{.j.}+\eta_{..k}-\eta_{...})+ \\
&\quad (\eta_{ij.}-\eta_{i..}-\eta_{.j.}+\eta_{...})+(\eta_{i.k}-\eta_{i..}-\eta_{..k}+\eta_{...})+ \\
&\quad (\eta_{.jk}-\eta_{.j.}-\eta_{..k}+\eta_{...})+(\eta_{i..}-\eta_{...})+(\eta_{.j.}-\eta_{...})+ \\
&\quad (\eta_{..k}-\eta_{...}))^2 \\
&= \sum_i\sum_j\sum_k p_i^{(1)}p_j^{(2)}p_k^{(3)}(\eta_{ijk}-\eta_{ij.}-\eta_{i.k}-\eta_{.jk}+\eta_{i..}+\eta_{.j.}+\eta_{..k}-\eta_{...})^2+ \\
&\quad \sum_i\sum_j p_i^{(1)}p_j^{(2)}(\eta_{ij.}-\eta_{i..}-\eta_{.j.}+\eta_{...})^2+ \\
&\quad \sum_i\sum_k p_i^{(1)}p_k^{(3)}(\eta_{i.k}-\eta_{i..}-\eta_{..k}+\eta_{...})^2+ \\
&\quad \sum_j\sum_k p_j^{(2)}p_k^{(3)}(\eta_{.jk}-\eta_{.j.}-\eta_{..k}+\eta_{...})^2+ \\
&\quad \sum_i p_i^{(1)}(\eta_{i..}-\eta_{...})^2+\sum_j p_j^{(2)}(\eta_{.j.}-\eta_{...})^2+ \\
&\quad \sum_k p_k^{(3)}(\eta_{..k}-\eta_{...})^2 \\
&= \operatorname{var}(\mu(z_1,z_2,z_3))+\operatorname{var}(\mu(z_1,z_2)+\operatorname{var}(\mu(z_1,z_3))+ \\
&\quad \operatorname{var}(\mu(z_2,z_3))+\operatorname{var}(\mu(z_1))+\operatorname{var}(\mu(z_2))+\operatorname{var}(\mu(z_3)).
\end{aligned} \tag{3-11}$$

特别地,当设计为等重复设计时,记 y_{ijkr} 为第(i,j,k)网点上的第 r 次重复的观测值,用 ε_{ijkr} 记该次试验的随机误差,则数据结构式

$$y_{ijkr}=y_{ijk}+\varepsilon_{ijkr}$$

$$(i=1,2,\cdots,t_1,j=1,2,\cdots,t_2,k=1,2,\cdots,t_3,r=1,2,\cdots,R),$$

则 η_{ijk} 的 L.S.估计为

$$\hat{\eta}_{ijk}=\frac{1}{R}\sum_r y_{ijkr}=y_{ijk.}.$$

由

$$\begin{aligned}\sum_i\sum_j\sum_k\sum_r(y_{ijkr}-y_{....})^2 &= \sum_i\sum_j\sum_k\sum_r(y_{ijkr}-\hat{\eta}_{ijk})^2+ \\ &\quad R\sum_i\sum_j\sum_k(\hat{\eta}_{ijk}-\hat{\eta}_{...})^2.\end{aligned} \tag{3-12}$$

将 $\hat{\eta}_{ijk}$ 代入式(3-11),即得平方和分解式

$$SS_T=SS_\varepsilon+N\operatorname{var}(\hat{\eta}(\mathbf{Z}))$$

$$= \mathrm{SS}_e + N\mathrm{var}(\widehat{\mu}(z_1, z_2, z_3)) + N\mathrm{var}(\widehat{\mu}(z_1, z_2)) + \cdots + N\mathrm{var}(\widehat{\mu}(z_3)),$$

其中 $N = Rt_1t_2t_3$.

3.3 k 阶交互效应模型与强度为 λ 的正交设计

假定在某设计下，指标函数 $\eta(\mathbf{Z})$ 能被展开成如下形式：

$$\eta(\mathbf{Z}) = \sum_{\beta=0}^{k+1}\sum_{\mathbf{Z}_\beta \subset \mathbf{Z}} \mu(\mathbf{Z}_\beta). \tag{3-13}$$

也就是说，对于一切大于 k 阶的交互效应函数均恒等于零，那么，把式(3-13) 称为 k 阶交互效应模型，简称 k 阶模型. 问题是在另一些设计下，k 阶模型的阶数是不是不变的?这个问题的答案是肯定的，因此模型的分类是合理的. 在式(3-13) 中，若 $k = 0$，则称为主效应模型或可加模型，$\eta(\mathbf{Z})$ 为各单变量函数之和. 当 $k = 1$ 时，式(3-13) 称为 1 阶交互效应模型，简称交互效应模型. 若式(3-13) 中某些小于 k 阶的交互效应也为零，则称为 k 阶不完全模型. 在实际的析因试验中，通常只考察 $k \leqslant 1$ 的完全或不完全交互效应模型.

假定一个设计能使 $\mathbf{Z}$ 的任何 λ 个分量相互独立，则称该设计为**强度为 λ 的正交设计**. 自然 $\lambda \leqslant m$. 例如在本章的例 2 中，等重复全面试验是 $\lambda = 3$ 的正交设计. 假如能做到对于任两因素是等重复全面试验，那么这就是强度为 2 的正交设计.

假定指标函数 $\eta(\mathbf{Z})$ 为可分离变量，表示为

$$\eta(\mathbf{Z}) = \sum_{\beta=0}^{k+1}\sum_{\mathbf{Z}_\beta \subset \mathbf{Z}} \varphi_{\mathbf{Z}_\beta}(\mathbf{Z}_\beta), \tag{3-14}$$

其中 $\varphi_{\mathbf{Z}_\beta}(\mathbf{Z}_\beta)$ 表示仅仅依赖分量 $\mathbf{Z}_\beta$ 的函数，但不一定是交互效应函数. 那么，可以证明，当强度 $\lambda = \min(m, 2(k+1))$ 的正交设计存在时，式(3-14) 可展开为 k 阶交互效应模型式(3-13)，并且成立方差分解式

$$\mathrm{var}(\eta(\mathbf{Z})) = \sum_{\beta=0}^{k+1}\sum_{\mathbf{Z}_\beta \subset \mathbf{Z}} \mathrm{var}(\mu(\mathbf{Z}_\beta)). \tag{3-15}$$

以上结果，为部分析因试验提供了理论依据. 也就是说，在 k 阶模型假定下，只要选择强度为 $2(k+1)$ 的正交设计就可以了. 特别地，在可加模型下，$\lambda = 2$；在一阶交互效应模型下，选择 $\lambda = 4$ 的正交设计就可以了. 这将大大地节省试验次数.

例 3 模型为可分离变量

$$\eta(\mathbf{Z}) = \sum_{i=1}^{m} \varphi_i(z_i). \tag{3-16}$$

对于强度为 2 的正交设计，式(3-16) 可表示为可加模型

$$E(\eta(\mathbf{Z})) = \sum_{i=1}^{m} \varphi_i \overset{\mathrm{def}}{=\!=\!=} \mu;$$

$$M(z_i) = \varphi_i(z_i) + \sum_{j \neq i} \varphi_j \qquad (i = 1,2,\cdots,m);$$
$$\mu(z_i) = \varphi_i(z_i) - \varphi_i,$$

这时,

$$\eta(\mathbf{Z}) = \mu + \sum_{i=1}^{m} \mu(z_i),$$
$$\mathrm{var}(\eta(\mathbf{Z})) = \sum_{i=1}^{m} \mathrm{var}(\mu(z_i)).$$

4 完备型正交表与 t^m 型析因试验设计

4.1 离散型设计与正交表

上一章中把一个设计定义为试验区域上的一个分布函数.但在实际试验问题中,所采用的设计大多是离散的,即在试验区域上所定义的分布是离散型分布,并且概率值为有理数.下面就讨论离散型正交设计.

设有 m 个因素,不论它是定量因素或是定性因素,均把它分成若干水平,分别记为 $t_1, t_2, \cdots, t_m$.这样,试验区域就被划分成 $t_1 \times t_2 \times \cdots \times t_m$ 个网格点,每个网格点就是一个处理.将因素的水平编码值用整数坐标记为 $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_m)^{\mathrm{T}}$,其中 $1 \leqslant a_i \leqslant t_i, i = 1,2,\cdots,m$, a_i 为第 i 因素的水平编码值,简称第 i 因素的 a_i 水平.相应地,也把指标函数 $\eta(\mathbf{Z})$ 离散化.这样,试验关心的仅仅是网格点上的值.若不混淆,则用 $\eta(\boldsymbol{a})$ 表示网格点上的函数值.

所谓离散型的析因设计,就是要确定挑选哪些处理(网格点)做试验,做多少次重复试验.这实际上就是给所有网格点赋予概率:没有试验的处理,其概率值为零;被挑选做试验的处理,其概率值根据其重复试验数确定.若网格点的所有处理都进行试验,则每点的概率都不为零,这样的试验叫做全面试验.若每点概率均相等,则这种试验称为等重复全面试验.显然,等重复全面试验是一种正交设计.若网格点上有的概率不为零,有的为零,则这种试验叫做部分试验,也叫做部分实施.

表 4-1

处理	因素				观测值 y_{ij}		
	z_1	z_2	$\cdots$	z_m			
1	a_{11}	a_{12}	$\cdots$	a_{1m}	y_{11}	$\cdots$	y_{1R_1}
2	a_{21}	a_{22}	$\cdots$	a_{2m}	y_{21}	$\cdots$	y_{2R_2}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
n	a_{n1}	a_{n2}	$\cdots$	a_{nm}	y_{n1}	$\cdots$	y_{nR_n}

为了试验操作和记录结果方便,通常把选出准备试验的处理列成表 4-1 所示的形式,称之为试验方案表.其中 $1 \leqslant a_{ij} \leqslant t_j$ 为第 i 处理中第 j 因素的水平编码值.表中每一行表示一个处理,每一列表示某个因素在试验中的水平编码值.约定表中的 n 个处理没有两个相同的.y_{ij} 表示第 i 处理在第 j 次重复的观测值.第 i 处理重复 R_i 次,全部试验共 $N = R_1 + R_2 + \cdots + R_n$ 次,第 i 处理的设计概率为 $R_i/N = p_i$.$n < t_1 t_2 \cdots t_m$,为部分试验;$n = t_1 t_2 \cdots t_m$,为全面试验;$R_1 = R_2 = \cdots = R_n$,为等重复全面试验,每个处理的设计概率为

$$p_i = \frac{1}{t_1 t_2 \cdots t_m}. \tag{4-1}$$

在一个部分试验方案表中,若其任意 λ 列所对应的 λ 个因素组成的 n 个处理是等重复全面试验,则这样的试验方案表称为**强度为 λ 的正交表**,记为 $L_n(t_1 \times t_2 \times \cdots \times t_m, \lambda)$.当 $\lambda = 2$ 时,该表简称为正交表,记为 $L_n(t_1 \times t_2 \times \cdots \times t_m)$.下面若没有特别声明,正交表一般均指强度为 2 的正交表.上一章已经证明,对于 $k \leqslant \frac{\lambda}{2} - 1$ 的 k 阶交互效应模型,强度为 λ 的正交表是一个正交设计.

那么,如何给定因素和它的水平,如何从网格点中挑选 n 个处理,使其构成一张强度为 λ 的正交表呢?这是一个很困难的组合数学问题.下面只对一些特殊情况给出构造正交表的方法.

4.2 完备型正交表的构造与列名运算

假定 m 个因素均取相同水平数 t,其网格点数为 t^m,通常这种试验称为 **t^m 型析因试验**.由于构造正交表要借用有限域工具,而有限域存在的充分必要条件是它的阶(即元素个数)为素数 p 的幂次.因此,本章限定 t^m 型析因试验的水平数 $t = p^s$ 为素数或素数幂次,如 $t = 2,3,2^2,5,7,2^3,3^2,11$ 等等.

用 $\{0,1,2,\cdots,t-1\}$ 表示有限域 $GF(t)$ 中的元素,同时也表示水平的编码号.若无特殊说明,下面对水平的运算,都是指在 $GF(t)$ 中的运算.

用 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_m)^{\mathrm{T}}$ 表示 m 维空间的点,其坐标 x_i 属于 $GF(t)$.因此,坐标属于 $GF(t)$ 上的 m 维空间的点,总共只有 t^m 个点.

称 $\varphi(x) = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_m x_m$ 为 $GF(t)$ 上的线性函数,其系数 a_i 属于 $GF(t)$,且不全为 0. $GF(t)$ 上的线性函数总共只有 $t^m - 1$ 个.若其两个线性函数的系数向量是线性无关的,则称这两个线性函数线性独立.可以证明,两两独立的线性函数共有

$$q = \frac{t^m - 1}{t - 1} \tag{4-2}$$

个.

用 $\varphi_1(\boldsymbol{x}), \varphi_2(\boldsymbol{x}), \cdots, \varphi_q(\boldsymbol{x})$ 表示 q 个两两独立的线性函数,并约定 $\varphi_j(\boldsymbol{x})(j = 1,2,\cdots,q)$ 中最后一个不为零的系数为 1,那么,这样的线性型称为标准型.显然两个不同的标准型线性函数一定是独立的.

用 $x_1,x_2,\cdots,x_{t^m}$ 共 t^m 个点表示行号，用 $\varphi_1(x),\varphi_2(x),\cdots,\varphi_q(x)$ 共 q 个两两独立的标准型线性函数表示列号，构成 $t^m\times q$ 的一张表. 表中的第 i 行、第 j 列的元素用行号对应的点 x_i 代入第 j 列对应的线性函数的值 $a_{ij}=\varphi_j(x_i)$ 表示. 不难证明，这就构成了具有 q 列的强度为 2 的正交表，记为 $L_{t^m}(t^q)$.

例如，当 $m=2,t=3$ 时，$GF(3)=\{0,1,2\}$，用模 3(mod 3) 同余运算构成域的运算，并由式(4-2) 得 $q=\dfrac{3^2-1}{3-1}=4$. 因此，可构造 9×4 的正交表 $L_9(3^4)$，$L_9(3^4)$ 的构造如表 4-2 所示.

表 4-2

行号	列号			
	1 $\varphi_1=[1,0]$	2 $\varphi_2=[0,1]$	3 $\varphi_3=[1,1]$	4 $\varphi_4=[2,1]$
1(0,0)	0	0	$0+0=0$	$2\times0+0=0$
2(0,1)	0	1	$0+1=1$	$2\times0+1=1$
3(0,2)	0	2	$0+2=2$	$2\times0+2=2$
4(1,0)	1	0	$1+0=1$	$2\times1+0=2$
5(1,1)	1	1	$1+1=2$	$2\times1+1=0$
6(1,2)	1	2	$1+2=0$	$2\times1+2=1$
7(2,0)	2	0	$2+0=2$	$2\times2+0=1$
8(2,1)	2	1	$2+1=0$	$2\times2+1=2$
9(2,2)	2	2	$2+2=1$	$2\times2+2=0$
列名	a	b	ab	a^2b

从上面构造方法可看到，表中前两列是由 9 个行号点坐标组成，即每个行号的第 1 个坐标构成第 1 列，第 2 个坐标构成第 2 列，如无特殊说明，下面都称之为基本列(即基列)，用单个字母表示列名；第 3 列由第 1 列的水平向量加第 2 列水平向量构成，列名用基本列的列名相乘表示；第 4 列是第 1 列向量乘 2 加第 2 列向量的结果，列名用按指数法则运算，即第 1 列列名的平方乘以第 2 列列名后的结果表示.

实际上，一个列名的指数就是该列对应线性函数的系数，因此列名之间的运算就是线性函数的运算. 这种转化给设计工作会带来许多方便. 譬如，在构造完备型表时，一般可先写出列名，然后再造表.

例如，当 $m=3,t=3$ 时，共有 $q=\dfrac{3^3-1}{3-1}=13$ 个标准化列. 用 a,b,c,3 个字母表示基本列名，则可先写出列名，$L_{27}(3^{13})$ 的标准化列名如表 4-3 所示.

列名的写出步骤是：首先，将基本列列名置于第 1,2,5 列；第 3,4 列由第 1,2 列生成，第 3 列为第 1 列名乘第 2 列列名，第 4 列为第 1 列列名平方乘第 2 列名；第 6

表 4-3

列号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
列名	a	b	ab	a^2b	c	ac	bc	abc	a^2bc	a^2c	b^2c	a^2b^2c	ab^2c

~ 9 列为第 5 列列名分别乘前 4 列列名而得；第 10 ~ 13 列分别为前 4 列列名平方后再乘第 5 列．这样就得到了最后一个字母的指数为 1 的标准化列名．

从上面的运算可看出，一个基本列可与任一列产生两个列名．实际上任何两列的列名都可按前一列列名乘后一列列名和前一列列名平方乘后一列列名的运算规则得到，这样产生的两列叫做这前一列和后一列的交互列．需要注意的是，上述所得的两列列名不一定是标准化列名．将一个列名标准化的方法就是用最后一个字母的指数去除前面字母的指数（即用逆元素乘前面的指数）．例如表 4-3 中第 8 列与第 13 列的两个交互列为：

(1) $abc \cdot ab^2c = a^2b^3c^2 = a^2b^0c^2 = a^2c^2 \overset{\text{标准化}}{\Longrightarrow} (a^2c^2)^2 = ac$ = 第 6 列列名

(2) $(abc)^2 \cdot ab^2c = a^3b^4c^3 = b$ = 第 2 列列名

即第 8，13 列可生成第 2，6 列，第 2，6 列为第 8，13 列的交互列．可以证明，对于以上列名运算规则，表 4-3 是完备的，即任何两列均可在列名表中找到它们的交互列．

对于一般的 m 与 $t = p^s$，标准化的列名表可按下面步骤给出：

(1) 用 m 个字母，$a, b, c, \cdots$，表示基本列的列名，分别置于第 $\frac{t^k - 1}{t - 1} + 1$ 列，$k = 0, 1, 2, \cdots, m - 1$，余下的 $\frac{t^m - 1}{t - 1} - m$ 个列名，将通过基本列的运算产生；

(2) 将第 1 基本列 a，分别做 $1, 2, \cdots, t - 1$ 次乘幂，然后与第 2 基本列 b 相乘得 $ab, a^2b, \cdots, a^{t-1}b$ 共 $t - 1$ 个列名，分别置于第 3 ~ $t + 1$ 列；

(3) 对前面已命名的 $t + 1$ 个列名，再分别作 $1, 2, \cdots, t - 1$ 次乘幂，然后与第 3 基本列 c 相乘、共得 $(t + 1)(t - 1)$ 个列名，分别置于第 $t + 3$ ~ $t^2 + t + 1$ 列；

(4) 再对前面的 $t^2 + t + 1$ 个列名，像(3)一样，分别做 1 ~ $t - 1$ 次乘幂后与第 4 基本列 d 相乘，得 $(t^2 + t + 1)(t - 1)$ 个列名，分别置于第 $(t^3 - 1)/(t - 1) + 2$ ~ $(t^4 - 1)/(t - 1)$ 列．如此类推，直到将 m 个基本列做完，即得 $q = (t^m - 1)/(t - 1)$ 个标准化列名表．

同样地，列名表中任两列，都可做出 $t - 1$ 个列名来．方法也是将前一列列名分别做 1 ~ $t - 1$ 次乘幂后，再与后一列列名相乘．这 $t - 1$ 个列名，有的可能不是标准列名，这时可做适当次幂后使其标准化．可以证明，经标准化后，这 $t - 1$ 个列名定能在列名表中找到相应的列，这 $t - 1$ 个列就叫该两列的交互列．这就是所谓的列名运算．由于列名运算的封闭性，所以把这一类型表叫完备型正交表．

给出列名表后，$L_{t^m}(t^q)$ 型正交表的制作就很方便了．首先排列出 t^m 个点坐标（通常按字典排法排列），其第 1 个坐标组成的列向量为第 1 基本列、第 2 个坐标组成的列向量为第 2 基本列．依次类推，第 m 个坐标组成的列向量为第 m 基本列．有了基本列向量后，其余各列均为基本列向量的线性和，系数为该列名的指数．

4.3　t^m 型析因设计与分析

t^m 型析因试验是指有 m 个因素,每因素均为 t 个水平,并要求对各阶交互效应进行分析的试验.最简单的试验设计就是等重复全面试验.它是正交设计,可按类似第 3 章例 2 的方法进行分析.但当 m 较大时,实际计算工作量将是非常繁重的,当 $t = p^s$ 时,若用完备型正交表 $L_{t^m}(t^q)$ 进行表格式的设计与分析,则分析工作就变得轻松多了.

表 4-4

	1	2	3	…	q	观测值				合计
	a	b	ab	…	$ab\cdots m$					
1	a_{11}	a_{12}	a_{13}	…	a_{1q}	y_{11}	y_{12}	…	y_{1R}	T_1
2	a_{21}	a_{22}	a_{23}	…	a_{2q}	y_{21}	y_{22}	…	y_{2R}	T_2
⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮	…	⋮	⋮
n	a_{n1}	a_{n2}	a_{n3}	…	a_{nq}	y_{n1}	y_{n2}	…	y_{nR}	T_n
合计	$T_0^{(1)}$	$T_0^{(2)}$	$T_0^{(3)}$	…	$T_0^{(q)}$					
	⋮	⋮	⋮		⋮	T				T
	$T_{t-1}^{(1)}$	$T_{t-1}^{(2)}$	$T_{t-1}^{(3)}$	…	$T_{t-1}^{(q)}$					
列平方和	$SS_{(1)}$	$SS_{(2)}$	$SS_{(3)}$	…	$SS_{(q)}$	SS_e				SS_T
自由度	$t-1$	$t-1$	$t-1$	…	$t-1$	$n(R-1)$				$nR-1$

t^m 型试验在正交表 $L_{t^m}(t^q)$ 中设计与分析的主要步骤如下.

(1)不失一般性,用表中 m 个基本列代表 m 个因素.这样,m 个基本列就组成试验方案,这是一个全面试验,试验的处理数 $n = t^m$,每个处理重复 R 次.

(2)将试验结果的观测值,登记在表的右侧(见表 4-4),共得 $N = nR$ 个观测值.

(3) 计算各种和(见表 4-4):

$$T_i = \sum_{j}^{R} y_{ij} = \text{第 } i \text{ 处理的观测值之和},$$

$$T = \sum_{i}^{n} T_i = \text{所有观测值之和},$$

$$T_l^{(k)} = \sum_{a_{ik}=l} T_i = \text{第 } k \text{ 列中水平为 } l \text{ 的 } T_i \text{ 之和}$$

$$(l = 0,1,\cdots,t-1;k = 1,2,\cdots,q).$$

(4) 计算各类平方和(见表 4-4):

$$SS_T = \text{总平方和} = \sum_{i}^{n}\sum_{j}^{R} y_{ij}^2 - \frac{T^2}{N},$$

$$SS_e = \text{误差平方和} = \sum_i^n \sum_j^R y_{ij}^2 - \sum_i \frac{T_i^2}{R};$$

$$SS_{(k)} = \text{第}\ k\ \text{列平方和} = \frac{t \sum_{i=0}^{t-1} (T_i^{(k)})^2}{N} - \frac{T^2}{N} \quad (k = 1,2,\cdots,q).$$

各平方和的自由度在表 4-4 中给出.

(5) 计算交互效应平方和.

任意 k 个因素的交互效应平方和为字母仅仅包含这 k 个因素的列平方和之和,包含这 k 个字母的列共有 $(t-1)^{k-1}$ 个列.自由度也为相应列的自由度之和,共有 $(t-1)^k$ 个自由度.例如,abc 三因素交互效应平方和为列名分别为 abc,a^2bc,$\cdots$,$a^{k-1}b^{k-1}c$ 共 $(t-1)^2$ 个列的列平方和之和,自由度为 $(t-1)^3$.

(6) 平方和分解式为

$$SS_T = SS_e + \sum_{j=1}^{q} SS_{(j)} = SS_e + \text{各种效应平方和之和}.$$

以上结果,均汇总在表 4-4 中,方差分析也就很简单了,这里不再赘述.

5　正交表与部分析因试验设计

5.1　可加主效应模型与强度为 2 的正交表设计

上一章讨论的是在完备型正交表上,对 m 个因素做等重复全面试验的设计与分析的问题,在那里因素的所有的各种效应,通过试验都是可估的.但当因素较多或水平数较大时,试验的工作量很大,有时不可能实现.因此,在析因试验中,一个突出问题是如何少做试验.解决这个问题的关键是减少模型中待估效应参数的个数.从一般原则上来说,试验的处理数不能少于模型中待估参数的独立个数.因此,本章将在假定某些高阶交互效应为零的条件下,讨论部分析因试验问题.

可加主效应模型是多因素析因试验中最简单,也是最常见的一种模型.如同在工程设计中常常在一个局部区域将目标函数用泰勒(C.I. Taylor) 级数展开的一次项去近似一样,可加模型(在第 3 章中的例 3 中讨论过) 可表示为

$$\eta(\boldsymbol{Z}) = \sum_{i=1}^{m} \varphi_i(z_i) \tag{5-1}$$

形式,其中 $\varphi_i(z_i)$ 为仅仅依赖变量 z_i 的一个未知函数.

若把 $\eta(\boldsymbol{Z})$ 离散化,分别划分成 $t_1, t_2, \cdots, t_m$ 个水平,则需要知道,$\eta(\boldsymbol{Z})$ 在网格 $t_1 \times t_2 \times \cdots \times t_m$ 上的值.用整数坐标表示网格点坐标,记第 i 处理(或叫第 i 网格)的坐标为

$$\boldsymbol{a}_i = (a_{i1}, a_{i2}, \cdots, a_{im})^{\mathrm{T}}$$

$$(1 \leqslant a_{ij} \leqslant t_j, j = 1,2,\cdots,m).$$

若选择一个强度为 2 的正交设计,式(5-1) 在网格点可表为

$$\eta(\boldsymbol{a}_i) = \mu + \sum_{j=1}^{m} \mu^{(j)}(a_{ij}), \tag{5-2}$$

这样,要估计网格点上的 $\eta(\boldsymbol{a}_i)$ 的函数值,只要估计式(5-2) 的 $1 + t_1 + t_2 + \cdots + t_m$ 个主效应值就可以了.由边界条件可得

$$\sum_{a_{ij}=1}^{t_j} \mu^{(j)}(a_{ij}) = 0 \qquad (j = 1,2,\cdots,m). \tag{5-3}$$

第 j 因素的主效参数间是不独立的.由式(5-3) 可知,独立的只有 $t_j - 1$ 个,因此模型式(5-2) 中,要估计的独立参数 l 仅仅只有

$$l = 1 + (t_1 - 1) + (t_2 - 1) + \cdots + (t_m - 1) \tag{5-4}$$

个.

假定已找到一张强度为 2 的正交表 $L_n(t_1 \times t_2 \times \cdots \times t_m)$,可用于安排模型式(5-2) 的试验.如表 4-2 所示的 $L_9(3^4)$,可用于安排 4 个三水平因素的可加模型试验;它从全部 81 个处理中挑选出 9 个处理来试验,即从全部处理中只挑选了 1/9.

从强度为 2 的正交表定义可知,要求任两列能构成等重复全面试验,因此,处理数 n 必须能被任两水平数乘积整除.记 $\{t_1 \times t_2, t_1 \times t_3, \cdots, t_{m-1} \times t_m\} = r$ 为任两水平数乘积的最小公倍数,强度为 2 的正交表试验的处理数 n,必须满足条件:

$$n = ar \leqslant t_1 t_2 \cdots t_m,$$

其中 a 是正整数.此外,可以证明

$$n \geqslant 1 + (t_1 - 1) + (t_2 - 1) + \cdots + (t_m - 1). \tag{5-5}$$

当式(5-5) 的等号成立时,称设计为**饱和设计**.换句话说,要估计 m 个因素的主效应,n 个处理的饱和设计是最少的了.

为下面统计分析方便,现对强度为 2 正交表与正交阵的关系,给出一点几何解释.

设 $L_n(t_1 \times t_2 \times \cdots \times t_m) = (a_{ij})$ 为正交表,令

$$\boldsymbol{P}_{(j)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{t_j}} & p_{12}^{(j)} & p_{13}^{(j)} & \cdots & p_{1t_j}^{(j)} \\ \frac{1}{\sqrt{t_j}} & p_{22}^{(j)} & p_{23}^{(j)} & \cdots & p_{2t_j}^{(j)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{t_j}} & p_{t_j2}^{(j)} & p_{t_j3}^{(j)} & \cdots & p_{t_jt_j}^{(j)} \end{bmatrix} \tag{5-6}$$

为 $t_j \times t_j$ 阶的正交矩阵.在上式中,除去第 1 列,用它的第 k 行向量$(p_{k2}^{(j)}, p_{k3}^{(j)}, \cdots, p_{kt_j}^{(j)})$ 去替代正交表中第 j 列水平为 k 的元素,于是将第 k 列扩展成 $n \times (t_j - 1)$ 阶矩阵,记

$$L_{(j)} = \begin{bmatrix} p^{(j)}_{a_{1_j}2} & p^{(j)}_{a_{1_j}3} & \cdots & p^{(j)}_{a_{1_j}t_j} \\ p^{(j)}_{a_{2_j}2} & p^{(j)}_{a_{2_j}3} & \cdots & p^{(j)}_{a_{2_j}t_j} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ p^{(j)}_{a_{n_j}2} & p^{(j)}_{a_{n_j}3} & \cdots & p^{(j)}_{a_{n_j}t_j} \end{bmatrix}. \tag{5-7}$$

其余各列也可作类似替换.这样,由 $L_n(t_1\times t_2\times\cdots\times t_m)$ 正交表,可得到一个 $n\times[1+(t_1-1)+\cdots+(t_m-1)]$ 矩阵,记

$$L=[1_n, L_{(1)}, L_{(2)}, \cdots, L_{(m)}], \tag{5-8}$$

其中 1_n 为所有元素为 1 的 n 维向量.由正交表定义不难证明,式(5-8)的矩阵 L 的各列正交,组成列向量正交矩阵,使正交表与正交矩阵有了直接关系.

用 $\mu(L_{(j)})$ 表示由矩阵 $L_{(j)}$ 的列向量所形成的(t_j-1)维子空间,于是一张正交表可把 n 维欧氏线性空间 $\mathbf{R}^n$ 分解为 $m+2$ 个直交子空间之和:

$$\mathbf{R}^n=\mu(1_n)\oplus\mu(L_{(1)})\oplus\cdots\oplus\mu(L_{(m)})\oplus\mu^{\perp}(L) \tag{5-9}$$

其中 $\mu^{\perp}(L)$ 为 $\mu(L)$ 的直交互补子空间.当正交表为饱和设计时,$\mu^{\perp}(L)$ 为 0 空间.

设 x 为 $\mathbf{R}^n$ 的任一向量,x 在 $\mu(L_{(j)})$ 的投影长度平方为

$$SS_{(j)}=x^{T}A_{(j)}x, \tag{5-10}$$

其中 $A_{(j)}=(t_j/n)L_{(j)}L_{(j)}^{T}$ 为投影阵.

若记 T 为 x 的所有分量之和,$T_k^{(j)}$ 为正交表第 j 列中水平为 k 所对应的 x 分量之和,则 x 与 $L_{(j)}$ 的第 l 列的内积为

$$\sum_{i=1}^{n}p^{(j)}_{a_{ij}l}x_i=\sum_{k=1}^{t_j}\sum_{a_{ij}=k}p^{(j)}_{kl}x_i=\sum_{k=1}^{t_j}p^{(j)}_{kl}T_k^{(j)}, \tag{5-11}$$

其中 $\sum_{a_{ij}=k}$ 表示对固定水平为 k 求和.这样,由式(5-10)、式(5-11)、式(5-7)和式(5-6),得

$$SS_{(j)}=\left(\frac{t_j}{n}\right)\sum_{k=1}^{t_j}(T_k^{(j)})^2-\frac{T^2}{n}. \tag{5-12}$$

从式(5-12)可看到,x 在 $\mu(L_j)$ 的投影并不依赖正交阵式(5-6)中后 t_j-1 列的系数.通常,选用正交多项表中各次项系数,用正交多项式同时拟合主效应.当然这已越出本篇内容,有兴趣读者可参看文献[1].

由式(5-9)和式(5-12),可得平方和分解式

$$SS_L=\sum_{j=1}^{m}SS_{(j)}+SS_{Me}, \tag{5-13}$$

其中

$$SS_L=\sum_{i=1}^{n}x_i^2-\frac{T^2}{n},$$

称为完全平方和.而 SS_{Me} 是 $\boldsymbol{x}$ 在 $\mu-(\boldsymbol{L})$ 上的投影,

$$SS_{Me} = SS_L - \sum_{j=1}^{m} SS_{(j)}$$

称为模型误差平方和.当正交表为饱和设计时,$SS_{Me} = 0$.

由上可见,给定一张正交表,就可将 $\boldsymbol{R}^n$ 空间进行正交分解,每列代表一个 $(t_j - 1)$ 维子空间,而各列平方和 $SS_{(j)}$ 为向量在该子空间的投影的平方长度.所谓一个正交表的试验设计,就是如何将模型中的各效应嵌入各子空间.

有上面的几何解释,对模型式(5-2),在 $L_n(t_1 \times t_2 \times \cdots \times t_m)$ 表上的等重复试验后可得到各效应的L.S.估计:

$$\hat{\mu} = \frac{T}{Rn}, \quad T = \sum_{i}^{n} \sum_{j}^{R} y_{ij},$$

$$\hat{\mu}_k^{(j)} = \frac{t_j T_k^{(j)} - T}{nR} \qquad (j = 1,2,\cdots,m, k = 1,2,\cdots,t_j),$$

其中

$$T_k^{(j)} = \sum_{a_{ij}=k} y_{il} = \text{第 } j \text{ 列、水平为 } k \text{ 的 } y_{il} \text{ 之和}.$$

各平方和为

$$SS_T = \sum_{i}^{n} \sum_{j}^{R} y_{ij}^2 - \frac{T^2}{nR};$$

$$SS_e = \sum_{i}^{n} \sum_{j}^{R} y_{ij}^2 - \frac{\sum_{i}^{n} T_i^2}{R}, T_i = \sum_{j}^{R} y_{ij};$$

$$SS_{(j)} = \frac{t_j}{nR} \sum_{k}^{t_j} (T_k^{(j)})^2 - \frac{T}{nR};$$

$$SS_L = \frac{\sum_{i}^{n} T_i^2}{R} - \frac{T^2}{nR};$$

$$SS_{Me} = SS_L - \sum_{j}^{m} SS_{(j)}.$$

平方和的分解式为

$$SS_T = SS_L + SS_e = \sum_{j}^{m} SS_{(j)} + SS_{Me} + SS_e$$

当 SS_{Me} 较大时,可怀疑主效应模型假定的正确性,应对模型假定进行显著性检验.只有在 SS_{Me} 不显著时,才可将它合并到 SS_e 中去.作为最后的误差方差的估计,其相应的自由度

$$f_{Me} = n - 1 - \sum_{j}^{m} (t_j - 1)$$

也要合并到误差自由度 $f_e = n(R-1)$ 中去.

5.2　k 阶交互效应模型与分辨力概念

前面已经看到,假若要估计 k 阶交互效应模型中的所有效应,至少要做强度为 $\lambda = 2(k+1)$ 的正交试验. 当 $k = 1$,即任意两因素的交互效应存在,而两个以上的交互效应均为零时,若要估计两因素交互效应,则要构造强度为 $\lambda = 4$ 的正交表. 当 $m \geqslant 4$ 时,$\lambda = 4$ 的正交表的任意 4 列,要构成四因素的等重复试验,因此,试验的处理数 n 必须为任意四因素的水平数乘积的公倍数. 有时候这个数是很大的. 例如,一个水平为 $2\times3\times3\times4\times5$ 的五因素试验,其任意四因素水平数乘积的最小公倍数为 $n = 360$,等于全面试验了,一点也节省不了试验的处理数.

在某些情况下,虽然知道某些交互效应存在,但并不想去估计它的值,于是试验设计引进了一种**混杂技术**,用通俗语言来说,就是把一些不想去估计的效应嵌入正交表的一个列或几个列中,从这些列所估计出的值,只反映这些效应的某种线性组合;但是那些需要估计的效应,却不受这些效应的影响.

上节已经证明,当一阶以上交互效应为零时,由强度为 2 的正交表可以得到主效应的估计. 然而当一阶交互效应存在时,所得到的估计值,不再反映主效应了,而是主效应与某些交互效应的线性组合,也就是主效应与某些交互效应混杂了. 可以证明,对于一阶交互模型,若用强度为 3 的正交表设计,可得到主效应估计,但一阶交互效应之间相互混杂. 因此,当仅仅关心主效应值,而不想估计二因素交互效应时,可采用强度为 3 的正交表,用于节省试验次数.

对于一般的情况,博克斯(G. E. P. Box) 和亨特尔(Hunter) 引进了 ***R* 分辨力方案**的定义,所谓 R 分辨力方案是指当大于 $R-f$ 个因素的交互效应不存在时,允许对 $f < \frac{R}{2}$ 个因素的交互效应作出估计.

由上定义可见:

强度为2的正交表设计是 $R = 3$ 的分辨力方案,即当二因素以上的交互效应不存在时,可对主效应作出估计;

强度3的正交表设计是 $R = 4$ 的分辨力方案,当3个以上因素的交互效应不存在时,对主效应可作出估计,但二因素交互效应相互混杂;

强度为4的正交表设计是 $R = 5$ 分辨力方案,当3个以上因素的交互效应不存在时,能对主效应和二因素交互效应作出估计.

读者可用类似方法证明,强度为 λ 的正交表设计是一个 $R = \lambda + 1$ 分辨力方案,当 $R-f$ 以上因素的交互效应不存在时,它能对 $f < \frac{R}{2}$ 因素的交互效应作出估计. 为使用方便,表 5-1 对几个常用正交表给出不同强度的列号.

表 5-1[①]

正交表	强度 3	强度 4	强度 5
	列号		
$L_8(2^7)$	1,2,4,7		
$L_{16}(2^{15})$	1,4,7,8,11,13,15	1,2,4,8,15	
$L_{32}(2^{31})$	1,2,4,7,8,11,13,14,16,19,21,22,25,26,28,31	1,2,4,8,16,31	1,2,4,8,16
$L_{27}(3^{13})$	1,2,5,10		
$L_{81}(3^{40})$	1,2,5,11,14,19,25,29	1,2,5,14,33	
$L_{64}(4^{21})$	1,2,6,12,15,21		

5.3　表头设计与点线图

前面考虑的 k 阶交互效应模型的设计问题，都是假定低于 k 阶的交互效应均不为零. R 分辨力方案仅保证所有 $f < R/2$ 因素的效应是可估的，其余小于 $R-f$ 个因素的效应是混杂的. 但在很多试验中，人们只希望估计若干个效应，对其余效应均认为不存在. 这种模型称不完全的 k 阶交互效应模型. 本节主要讨论不完全效应模型的试验设计问题.

所谓表头设计，就是将提出来需要通过试验去估计的效应嵌入正交表的列中. 这个问题不是对所有类型正交表都能简单实现的. 下面仅限于讨论完备型正交表的表头设计.

在介绍完备型正交表构造时，已经介绍过列名运算规则. 当任何两个因素安排在表中的两列后，这两列所产生的 $t-1$ 个列也就唯一确定了. 因素所占的列，即为主效应列；由该两列所产生的列，即为交互效应列. 试验完成后即可用这些列去估计主效应和交互效应及其平方和. 需要特别注意的是，两个待估效应不能同时占有一个列. 这就是表头设计的基本原理. 那么，在给定因素水平及待估的效应之后，是否有一种确定程序来作出表头设计呢？由于设计的多样性，很难给出确定程序，所使用的方法主要为试探法. 现举一个简单例子加以说明.

设有 4 个二水平因素，分别用 A, B, C, D 表示. 模型中待估效应除 4 项主效应 A, B, C 和 D 外，还包括 AB, AC 和 BC 等 3 项交互效应，D 与其余因素的交互效应为零. 这是一个不完全的二阶交互效应模型. 待估效应共有 7 项，因此起码要有不少于 7 列的二水平正交表. 首先从 $L_8(2^7)$ 着手，它有 7 个列，其列名表见表 5-2.

---

① 以"常用数理统计表"中列号为准.

表 5-2

列号	1	2	3	4	5	6	7
列名	*a*	*b*	*ab*	*c*	*ac*	*bc*	*abc*
表头	*A*	*B*	*AB*	*C*	*AC*	*BC*	*D*

一般先安排有交互效应因素，将 *A*，*B* 分别放在表的 1、2 两列．由列名运算可知，交互效应 *AB* 占有第 3 列．至此，表的第 1,2,3 列已分别被 *A*、*B* 和 *AB* 占有，*C* 与 *D* 及余下交互效应只能安排到第 4～7 列中去．若把 *C* 置于第 4 列，通过列名运算，*AC* 占有第 5 列，*BC* 占有第 6 列，最后只剩下第 7 列．由于 *D* 与其他 3 个因素均无交互效应，正好可用第 7 列安排．这就得到表 5-2 所示的表头设计．这时表的第 1,2,4,7 列构成试验方案，是 $\frac{1}{2}$ 实施方案，只需从全部 16 个处理中挑选出 8 个处理来试验．

表头设计不是唯一的．譬如，对于上例，也可采用表 5-3 所示的设计．这时由第 1,2,4,7 所构成的方案中的 8 个处理与前面的 8 个处理不全相同；但若模型假定正确的话，试验后数据分析的结论应该一致．

表 5-3

列号	1	2	3	4	5	6	7
表头	*C*	*B*	*BC*	*D*	*AB*	*AC*	*A*

为了使实际工作者做表头设计方便，在一些正交表后面附有点线图．**点线图**是根据有限仿射几何理论建立的．在有限域 $GF(t)$ 上的 m 个变量的线性函数，可以定义为 m 维有限仿射几何的一个点．m 维仿射几何共有

$$q=(t^m-1)/(t-1)$$

个不同点和 q 条不同的直线．任何两点可联成一条线，一条线上有 $t+1$ 个点．由完备型正交表的构造可知，它的每列对应着 m 维仿射几何的一个点，两列的交互列对应该两列联线上的其余 $t-1$ 个点．这样，就可用形象化的点线图关系来表示完备型正交表的表头设计了．

例如，$L_8(2^7)$ 共有7个点(列)．用点和线表示列之间的一种关系，两点相联表

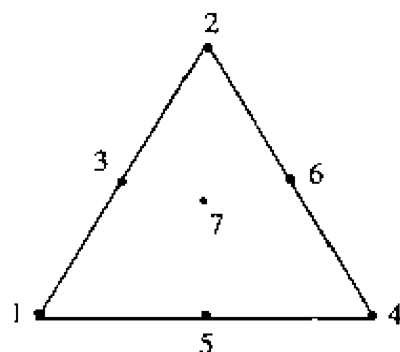


图 5-1

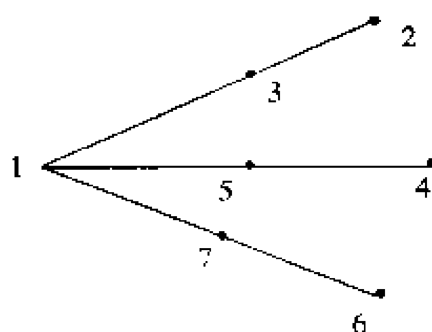


图 5-2

示要考虑交互效应，直线上的点对应交互列；若两点不相联即表示它们间不存在交互效应.于是，一个表头设计，就对应一张点线图.每列只在点线图中出现一次，且仅仅一次.上面表5-2所示的表头设计，对应于图5-1所示的点线图.

显然，同一张正交表可画出各种形状的点线图.如图5-2所示的是 $L_8(2^7)$ 的另一张点线图，也是安排4个因素，但2,4,6列之间不存在交互效应，对应的表头设计如表5-4所示.

表5-4

列号	1	2	3	4	5	6	7
表头	*A*	*B*	*AB*	*C*	*AC*	*D*	*AD*

又如，对于 $L_{27}(3^{13})$ 的常用点线图，其中有如图5-3和图5-4所示的设计.

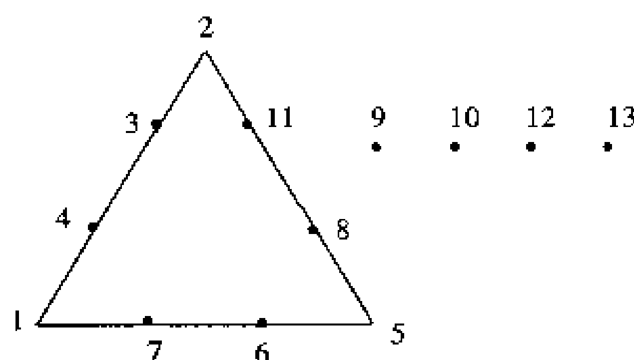


图5-3

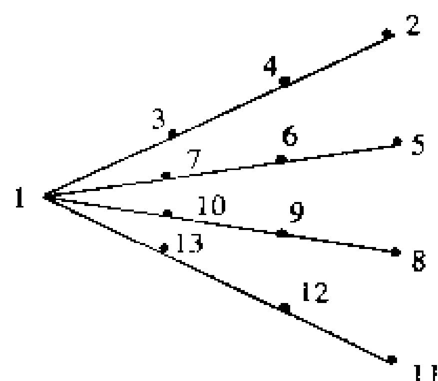


图5-4

它们所对应的表头设计分别如表5-5和表5-6所示.

表5-5

列号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
表头	*A*	*B*	*AB*	*AB*	*C*	*AC*	*AC*	*BC*	*D*	*E*	*BC*	*F*	*G*

表5-6

列号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
表头	*A*	*B*	*AB*	*AB*	*C*	*AC*	*AC*	*D*	*AD*	*AD*	*E*	*AE*	*AE*

它们分别可安排7个和5个因素以及若干个交互效应.需要注意的是，当因素少于点线图所要求时，还是可以使用这个图，只要把那些列空着就可以了.

5.4 正交表试验的区组设计

正交表设计，仅仅是根据模型中待估效应的要求，完成处理的挑选.但是为了获得试验误差估计和确保效应估计的正交性，还需要每个处理重复试验相同的

$R\geq 1$次.换句话说,总共需要试验 nR 次.要把 nR 次试验安排到 nR 个试验单元,并且要求 nR 个单元的条件保持一致,一般是很难做到的,这就提出了一个区组设计问题.

在正交表试验中,常用两种区组设计方法,一种叫完全重复区组设计,另一种叫分组重复区组设计.

当处理数 n 不是太大时,可要求每次重复时保持试验单元一致,不同重复间可以允许有一定差异,也就是说,可以把 n 个处理安排到 R 个完全区组中去进行试验,这称为**完全重复区组设计**.在完全重复区组设计中,重复条件上的差异,一般不会影响到因素的各种效应的估计及其平方和,但是它将影响到重复误差平方和 SS_e.为了获得较小误差估计,必须按完全随机区组设计中的方法修正 SS_e 的值.

当处理数 n 较大时,要在一套重复试验中保持 n 个试验单元的一致性,有时很难做到.譬如,在工业性试验中,要在一个设备上做完一套重复试验,周期会拖得很长.这时需要将处理分成若干组,在几套设备上,由几个工人同时操作.因此,在试验实施过程中存在一个将处理分组问题.试验按组进行,组内试验条件要求一致,而组与组之间允许有一定的差异.这就叫**分组重复区组设计**.

如何把由正交表所选出的 n 个处理进行分组呢? 一般来说,要求所使用的正交表在安排了因素的效应后,还留有空列.记该空列的水平为 b,根据这一列的水平号,可将 n 个处理分成不同的水平 b,对应同一水平的处理分为一个组,每组有 $k=n/b$个处理.这个用来分组的列,称为区组列.分组试验的组间的不均匀性,将集中反映在区组列的列平方和之中;而其他因素的效应都不会受到任何影响,按原来方法进行分析.每做完 n 个处理的一次重复,使用了 b 个区组,需计算一次区组列的平方和.R 次重复,实际上使用了 Rb 个区组.区组的影响,仅仅涉及误差平方和与模型误差平方和,需对这二项作出修正.详细方法可参看文献[1].

当正交表的所有列均被各种效应占据,无空列可用来分区组时,可用部分混杂法.所谓**部分混杂法**,就是在 R 次重复试验中,采用 R 个不同列来划分区组,虽然在一次重复时某列效应被区组效应所混杂,但在其余的 $R-1$ 次重复中,该效应依然可得到估计,可以证明这样的区组划分法是一种 PBIB 设计,数据分析也很简单.由于篇幅关系,对此这里就不再介绍了.

6 回归设计

6.1 二次曲面的复合设计

在比较试验和析因试验中,把指标函数 $\eta(\mathbf{Z})$离散化后,仅要讨论若干处理点上的值,所用的统计分析方法也主要是方差分析法.本章将讨论两种常用的回归设计问题.在这里要求所有因素是定量变量,模型 $\eta(\mathbf{Z})$是定义在试验区域上的多项式函数.

设 $z_1, z_2, \cdots, z_m$ 是 m 个定量变量，在一个确定试验区域上变化．对于任一变量 z_i，取定两个值 z_{i1} 和 z_{i2}，$z_{i1} > z_{i2}$，称 z_{i1} 和 z_{i2} 为 z_i 的两个水平值；称 $z_{i0} = (z_{i1} + z_{i2})/2$ 为 z_i 的中心值，$h_i = (z_{i1} - z_{i2})/2$ 为 z_i 的试验步长．在实际试验问题中，z_i 是带有量纲的值．为下面讨论方便，在此引进新的无量纲变量：

$$x_i = \frac{z_i - z_{i0}}{h_i} \qquad (i = 1, 2, \cdots, m). \tag{6-1}$$

经过上式变换后，中心点 $(z_{10}, z_{20}, \cdots, z_{m0})$ 变到新变量的坐标原点 $(0, 0, \cdots, 0)$ 上．各变量的两个水平值 z_{i1}, z_{i2} 分别变为 1 与 -1．称式(6-1)的变换为标准化变换；经过变换后的变量 x_i 称为标准化变量，它不再含有量纲．为了统一，本节中所有变量都假定是经过标准化了的．

所谓二次曲面的复合设计就是对二次多项式模型

$$\eta(\boldsymbol{x}) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_m x_m + \beta_{12} x_1 x_2 + \cdots + \beta_{m-1,m} x_{m-1} x_m + \beta_{11} x_1^2 + \cdots + \beta_{mm} x_m^2, \tag{6-2}$$

进行分批序贯试验的一种正交设计方法．

上式中共有 $1 + m + \binom{m}{2} + m = \binom{m+2}{2}$ 个待估的回归系数．要估计这 $\binom{m+2}{2}$ 个系数，至少要在 $\binom{m+2}{2}$ 个不同处理点上做试验．若试验点任意取值，则要估计 $\binom{m+2}{2}$ 个回归系数，必须求解 $\binom{m+2}{2}$ 阶线性方程组．这不仅计算工作量大，而且估计精度往往很低．

对于模型式(6-2)，博克斯(1951) 等提出了一种较为合理的设计，这种设计把整个试验分解成三批，序贯地完成．

第一批，在中心点 $(0, 0, \cdots, 0)$ 作 n_0 次重复试验．记 $y_{01}, y_{02}, \cdots, y_{0n}$ 为观测值，计算平均值 $\overline{y}_0$ 与重复误差平方和：

$$SS_{e0} = \sum (y_{0i} - \overline{y}_0)^2.$$

这一批试验的主要目的是考察试验系统的可重复性．当误差方差较大时，应改善试验条件，使试验具有一定精度．

第二批，在完成第一批试验后，在试验具有可重复性条件下，再对每个变量分别选择适当的步长，给出 ± 1 的两个水平值；然后选用一张适当大小的二水平完备型正交表，从中取出强度为 4 的 m 个列，组成一张 $L_n(2^m)$ 型试验方案表，表中二水平用 -1 代替．在完成正交表 $L_n(2^m)$ 中的 n 个试验(不带重复!)后，计算其平均值 $\overline{y}$，与第一批的平均值 $\overline{y}_0$ 做显著性检验．若二者无显著差异，说明模型式(6-2) 不含二次项，则可停止试验，用两批的 $n_0 + n$ 个试验观测值去估计线性回归模型

$$\eta(\boldsymbol{x}) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_m x_m \tag{6-3}$$

其中回归系数的估计公式为

$$\hat{\beta}_0 = \frac{n_0 \overline{y}_0 + n \overline{y}}{n_0 + n},$$

$$\widehat{\beta}_i = \frac{T_1^{(i)} - T_{-1}^{(i)}}{n} \qquad (i = 1,2,\cdots,m), \tag{6-4}$$

其中 $T_1^{(i)}$ 与 $T_{-1}^{(i)}$ 分别表示正交表 $L_n(2^m)$ 试验中第 i 个变量的 1 水平与 -1 水平的观测值之和.

假若前面检验的$\overline{y}$ 与$\overline{y}_0$有显著差异，说明模型式(6-2) 的二次项存在. 这时需要增加试验才能估计.

第三批，在每个变量的坐标轴上，选取臂长为 $\pm\alpha$ 的两个对称点，m 个变量共有 $2m$ 个点. 相应地需做 $2m$ 个试验.

三批试验总共完成 $N = n_0 + n + 2m$个试验. 这 N个试验点分布在以中心点为球心的两个同心球面上，第一批试验是中心点的重复试验；第二批的 n个点分布在半径为$\sqrt{2}$ 的球面上，用来探测二次项（实际是平方项!）是否存在；第三批的 $2m$ 个点分布在半径为α 的球面与 m 个轴的交点上. 完成三批试验后，模型式(6-2) 的 $\binom{m+2}{2}$个回归系数是可估的. 由于这个设计由三部分组成，因此也称**复合设计**.

在试验设计中，臂长 α 的值，只要 $\alpha \geqslant 1$，可以任意选取. 但为了估计系数计算简便，且估计精度最高，可以证明，如取

$$\alpha^2 = \frac{\sqrt{Nn} - n}{2}, \tag{6-5}$$

则这个设计就是正交设计，各回归系数的估计就是独立的. 为了常数项估计方便，不失一般性地可将式(6-2) 改写为

$$\eta(x) = b_0 + \sum_i^m \beta_i x_i + \sum_{i<j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_i \beta_{ii}\left[x_i^2 - \frac{(n+2\alpha)^2}{N}\right], \tag{6-6}$$

则各系数的最小二乘估计为

$$\widehat{b}_0 = \frac{T}{N},$$

$$\widehat{\beta}_i = \frac{T_1^{(i)} - T_{-1}^{(i)} + \alpha(y_{i\alpha} - y_{i-\alpha})}{n + 2\alpha^2},$$

$$\widehat{\beta}_{ij} = \frac{T_1^{(i,j)} - T_{-1}^{(i,j)}}{n},$$

$$\widehat{\beta}_{ii} = \frac{T_1 + \alpha^2(y_{i\alpha} + y_{i-\alpha}) - (n + 2\alpha^2)\dfrac{T}{N}}{2\alpha^4} \qquad (i, j = 1,2,\cdots,m),$$

其中 T 为所有 N 个观测值之和；$y_{i\alpha}$ 与$y_{i-\alpha}$ 为第 i 变量分别在坐标轴上α 点与 $-\alpha$ 点上的观测值；T_1 为第二批试验的 n 个观测值之和.

各系数估计量的方差分别为：

$$\mathrm{var}(\widehat{b}_0) = \frac{\sigma^2}{N},$$

$$\mathrm{var}(\widehat{\beta}_i) = \frac{\sigma^2}{n + 2\alpha^2},$$

$$\mathrm{var}(\widehat{\beta}_{ij}) = \frac{\sigma^2}{n},$$

$$\mathrm{var}(\widehat{\beta}_{ii}) = \frac{\sigma^2}{2\alpha^4} \qquad (i,j = 1,2,\cdots,m).$$

各估计量间协方差均为零.

各系数的偏回归平方和为

$$SS_{\beta_i} = (n + 2\alpha^2)\widehat{\beta}_i^2,$$

$$SS_{\beta_{ij}} = n\widehat{\beta}_{ij}^2,$$

$$SS_{\beta_{ii}} = (2\alpha^4)\widehat{\beta}_{ii}^2 \qquad (i,j = 1,2,\cdots,m).$$

回归的残差平方和为

$$SS_{Re} = SS_T - \sum_i^m SS_{\beta_i} - \sum_{i<j} SS_{\beta_{ij}} - \sum_i^m SS_{\beta_{ii}},$$

自由度为

$$f_{Re} = N - \binom{m+2}{2}.$$

这样,F 检验和置信域均可简单给出,这里就不再赘述.

6.2　配料试验与设计

在科学试验中,配料问题是一类常见的试验问题.在这类试验中,因素是配料中各成分的比值,而不是各成分的绝对用量.由于各成分的比值之和为1,因此各因素变量不能完全自由变化,而有一个约束条件.那么,在因素诸变量间带有约束条件下,如何实现试验的布点呢?这正是本节讨论的主题.

6.2.1　单纯形和谢菲多项式

在讨论配料设计之前,先得介绍单纯形和谢菲(H.Scheffé)多项式.

设 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n$ 是 m 维欧氏空间的 n 个线性无关向量,则称区域

$$\mathscr{S} = \left\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x} = \sum_i^n x_i\boldsymbol{a}_i,\ x_i \geqslant 0,\ \sum_i^n x_i = 1\right\} \tag{6-7}$$

为 m 维欧氏空间中的 $n-1$ 维**单纯形**. $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n$ 为此单纯形的顶点.任意两顶点间的距离均为单纯形的边长.若单纯形的所有边长相等,则称**正单纯形**.例如,三角形、四面体都是单纯形;而正三角形、正四面体是正单纯形.

若用 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 表示配料试验中的 m 个成分的比值,它们满足

$$x_i \geqslant 0 \qquad i = 1,2,\cdots,m,\quad \sum_i^m x_i = 1, \tag{6-8}$$

条件,则可以证明这 m 个变量的(值域)试验区域是 m 维空间中 $m-1$ 维正单纯形,记 $\boldsymbol{e}_i = (0,0,\cdots,0,1,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}$ 为第 i 坐标轴上的单位向量,满足式(6-8)约束的 -

组值，可用 $m-1$ 维正单纯形

$$\mathscr{S}=\left\{x:\sum_{i}^{m}x_i e_i,\ x_i\geqslant 0,\ \sum_{i}^{m}x_i=1\right\}\tag{6-9}$$

表示.此正单纯形边长为$\sqrt{2}$.

例如，$m=2$ 时，它是连接$(1,0)^{\mathrm{T}}$和$(0,1)^{\mathrm{T}}$的线段.$m=3$时，它是顶点为$(1,0,0)^{\mathrm{T}}$、$(0,1,0)^{\mathrm{T}}$和$(0,0,1)^{\mathrm{T}}$的正三角形.

由上可见，在配料试验中，各成分比值可用正单纯形中的点表示.

在配料试验的回归多项式模型中，由于$\sum_{i}^{m}x_i=1$，因此一阶多项模型

$$\eta(x)=\alpha_0+\sum_{i}^{m}\alpha_i x_i$$

可简化为

$$\eta(x)=\sum_{i}^{m}(\alpha_0+\alpha_i)x_i,$$

即不带常数项.称

$$\eta_1(x)=\sum_{i}^{m}\beta_i x_i\tag{6-10}$$

为一阶谢菲多项式模型.

类似地，由于 $x_i^2=(1-\sum_{j\neq i}x_j)x_i$，二阶多项式可简化为

$$\eta_2(x)=\eta_1(x)+\sum_{1\leqslant i<j\leqslant m}\beta_{ij}x_i x_j.\tag{6-11}$$

式(6-11)称为二阶谢菲多项式，其中 $\eta_1(x)$ 为一阶谢菲多项式.一般地，三阶谢菲多项式为

$$\eta_3(x)=\eta_2(x)+\sum_{1\leqslant i<j\leqslant m}\gamma_{ij}x_i x_j(x_i-x_j)+\sum_{1\leqslant i<j<k\leqslant m}\beta_{ijk}x_i x_j x_k,\tag{6-12}$$

其中 $\eta_2(x)$ 为二阶谢菲多项式.若令 $\gamma_{ij}=0$，则式(6-12)简化为

$$\widetilde{\eta}_3(x)=\eta_2(x)+\sum_{1\leqslant i<j<k\leqslant m}\beta_{ijk}x_i x_j x_k.\tag{6-13}$$

式(6-13)称为不完全三阶谢菲多项式.

在配料设计中，主要采用谢菲多项式模型.

6.2.2 单纯形格点设计

设有 m 个成分的配料试验，现将每成分比值各取 $n+1$ 个水平：

$$x_i=0,\frac{1}{n},\frac{2}{n},\cdots,\frac{n-1}{n},1\qquad(i=1,2,\cdots,m).$$

显然$(n+1)^m$个网格点不全属于$m-1$维的正单纯形中，只有满足$\sum_{i}^{m}x_i=1$的网格点，才在正单纯形中.属于正单纯形的点称为$\{m,n\}$格点.例如，$\{3,3\}$格点是

$$(x_1,x_2,x_3)=(1,0,0),(0,1,0),(0,0,1),$$
$$\left(\frac{2}{3},\frac{1}{3},0\right),\left(\frac{2}{3},0,\frac{1}{3}\right),\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3},0\right),\left(\frac{1}{3},0,\frac{2}{3}\right),$$
$$\left(0,\frac{2}{3},\frac{1}{3}\right),\left(0,\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right),\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right).$$

共10个点,如图6-1所示.

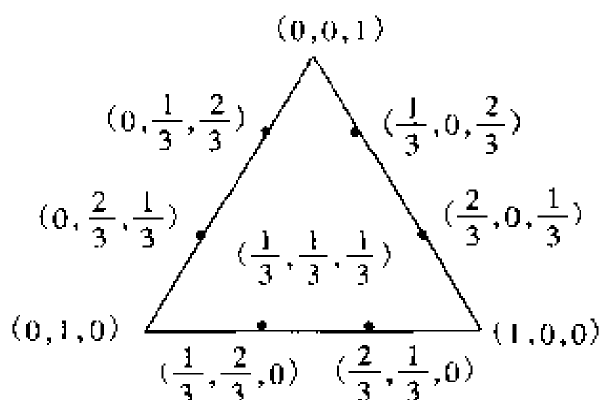


图6-1

可以证明,$\{m,n\}$格点共有$\binom{m+n-1}{n}$个点.若在所有格点上都进行试验,则这样的设计称单**纯形格点设计**.由图6-1可看到,单纯形格点设计布点比较匀称.由于m个变量的n阶谢非多项式也正好有$\binom{m+n-1}{n}$个待估系数,因此,对于n阶谢非多项式模型,$\{m,n\}$格点设计是饱和设计,回归系数可直接解出.在不带重复试验时,饱和设计没有误差自由度,这时可用低于n阶的多项式拟合模型,根据一般回归程序进行统计分析.

6.2.3 单纯形形心设计

在$m-1$维正单纯形的m个顶点中任取l个顶点,这l个顶点组成$l-1$维正单纯形.例如,$m=3$时,取$l=1$,三个顶点组成三个退化的0维单纯形;取$l=2$,三条边组成三个一维单纯形.在$m-1$维正单纯形中,所有可能组成的正单纯形(包括退化的顶点!)共有2^m-1个.每个单纯形都有一个重心.重心就是各顶点的平均向量.例如,$m=3$,共有$2^3-1=7$个单纯形,其重心分别为$(1,0,0),(0,1,0),(0,0,1),\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right),\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right),\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$及$\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right)$,如图6-2所示.从图6-2可看到,所有低维的重心点,在单纯形中的分布是相当对称的.这2^m-1个重心,称为$m-1$维单纯形的形心.若所有试验的处理均在形心上做,则称为**形心设计**.

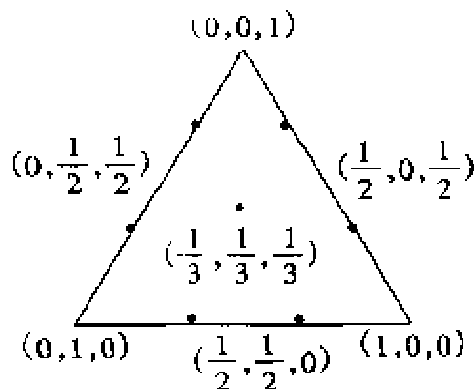


图6-2

当$m\geqslant3$时,由式(6-12)可知,谢非多项式的变量是非对称的;但其不完全三阶多项式式(6-13)是对称三阶多项式.式(6-13)称为三阶**形心多项式**.一般n次形心多项式为

$$\eta_n(\boldsymbol{x}) = \eta_{n-1}(\boldsymbol{x}) + \sum_{1\le i_1<\cdots<i_m\le m} \beta_{i_1,i_2,\cdots,i_m} x_{i_1}, x_{i_2}\cdots x_{i_m}, \tag{6-14}$$

其中 $\eta_{n-1}(\boldsymbol{x})$ 为 $n-1$ 阶形心多项式.

显然,n 次形心多项式的系数共有 $\binom{m}{1}+\binom{m}{2}+\cdots+\binom{m}{n}$ 个. 特别地,当 $n=m$ 时,其系数正好等于形心的个数. 因此,对于 m 阶形心多项式模型,形心设计是饱和设计.

6.2.4 对称单纯形设计

$\{m,n\}$ 格点设计共有 $\binom{m+n-1}{n}$ 点,但只有很少几个点是试验区域内点. 形心设计的 2^m-1 个点中,仅有一个内点. 而在许多实际问题中,希望在区域内点上取更多一些点. 下面介绍的对称单纯形设计,可克服格点设计和形心设计的这个缺点.

假设给定正整数 $d_1,d_2,\cdots,d_n$ 和互不相同的正数 $q_1,q_2,\cdots,q_n$ 满足条件

$$\sum_i^n d_i = d \leqslant m, \quad \sum_i^n d_i q_i = 1. \tag{6-15}$$

给定 m 个配料成分的比例如下: d_1 个成分比例为 q_1, d_2 个成分比例为 q_2,…, d_n 个成分比例为 q_n,余下 $m-d$ 个成分比例为 0.

记 $\boldsymbol{G}(m;0^{m-d},q_1^{d_1},q_2^{d_2},\cdots,q_n^{d_n})$ 为满足上述条件的所有可能排列的一个 m 列矩阵,每行表示一个设计点. 由一个或多个 $\boldsymbol{G}(m;0^{m-d},q_1^{d_1},q_2^{d_2},\cdots,q_n^{d_n})$ 组成的设计,总称为 m 个成分的**对称单纯形设计**.

不难验证,格点设计和形心设计都是对称单纯形设计的一种. 例如,$\{4,3\}$ 格点设计,可取 $\boldsymbol{G}(4;0^3,1)$, $\boldsymbol{G}(4;0^3,\frac{1}{3},\frac{2}{3})$ 及 $\boldsymbol{G}(4;0,(\frac{1}{3})^3)$ 三部分矩阵组成:

$$\boldsymbol{G}(4;0^3,1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{G}(4;0,(\frac{1}{3})^3) = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{bmatrix},$$

$$G(4;0^2,\frac{1}{3},\frac{2}{3})=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}^{T}$$

类似地，m 个成分的形心设计，由 $G(m;0^{m-d},(\frac{1}{d})^d)$，$d=1,2,\cdots,m$ 的 m 个矩阵组成.

然而，在对称设计中，还可根据实际问题要求选择 d_i 与 q_i，使得有足够多的内点. 例如，$m=3$ 时，可选 $G(3;(\frac{1}{3})^3)$ 与 $G(3;\left(\frac{1}{6}\right)^2,\frac{4}{6})$ 共4个点：

$\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right)$，$\left(\frac{4}{6},\frac{1}{6},\frac{1}{6}\right)$，$\left(\frac{1}{6},\frac{4}{6},\frac{1}{6}\right)$，$\left(\frac{1}{6},\frac{1}{6},\frac{4}{6}\right)$，如图 6-3 所示，这

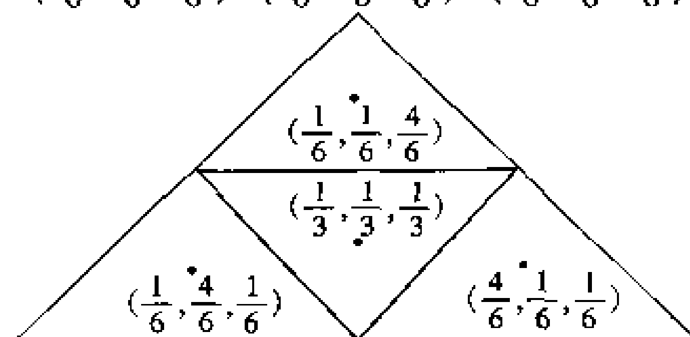


图 6-3

4个点恰好是4个正三角形的重心，而且都是内点.

6.3　有限制的配料试验设计

在一些配料试验中，各成分的比值 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 除满足式(6-8)外，还要求某些成分有一定上、下限限制，即要求

$$0\leqslant a_i\leqslant x_i\leqslant b_i\leqslant 1\qquad(a_i<b_i,i=1,2,\cdots,m),\tag{6-16}$$

称这种配料试验为有限制的配料试验.

为使式(6-16)的限制有意义，自然要求

$$\sum_{i}^{m}a_i<1,\quad\sum_{i}^{m}b_i>1\tag{6-17}$$

条件成立. 可以证明，在上述限制下，其试验域是 $m-1$ 维单纯形中的一个凸多面体. 下面分两种情况，讨论它的设计问题.

6.3.1　只有下限限制的情形

假设配料的各成分仅仅要求

$$0 \leqslant a_i \leqslant x_i \leqslant 1 \qquad (i = 1,2,\cdots,m).$$

由式(6-17)，得

$$a_i \leqslant x_i = 1 - \sum_{j \neq i}^{m} x_j \leqslant 1 - \sum_{j \neq i}^{m} a_j$$

的取值范围．如作如下变换：

$$u_i = \frac{x_i - a_i}{1 - \sum_{j=1}^{m} a_j} \qquad (i = 1,2,\cdots,m). \tag{6-18}$$

显然，当 $x_i = a_i$ 时，$u_i = 0$；当 $x_i = 1 - \sum_{j \neq i}^{m} a_j$ 时，$u_i = 1$，且 $\sum_{i}^{m} u_i = 1$．这样，对 u_i 来说，以上问题就是一个不带限制的配料设计问题，上节介绍的方法就可应用了．

6.3.2　有上下限限制的情形

对于有上下限的配料试验，设计方法比较麻烦．下面通过例子来介绍两种设计方法．

1. 端顶点设计

这种设计方法，主要通过布点筛选法来实现．其步骤如下：

(1) 对于 m 种成分中的每 $m-1$ 个成分，用其成分的上下限作为两水平，列出 2^{m-1} 个水平组合，将剩下的一个成分的比值空着．这样总共可列出 $m \times 2^{m-1}$ 个各有 $m-1$ 个成分的比值．

(2) 逐一检查上述 $m \times 2^{m-1}$ 个比值中 $m-1$ 个成分的水平组合，如果已写出的 $m-1$ 个成分的比值之和大于 1，则将其删除；不然，则把空着的未被填写上比值的成分填上，使 m 个成分的比值之和为 1．如果新填上的成分比值在该限定的上下限之内，则保留这个成分组合，否则也只能删去．

通过以上步骤，得到凸区域的所有端顶点．有的端顶点可能重复出现多次，但只保留一次．

(3) 分别找出 $m-1, m-2, \cdots$，二维凸多面体的形心．$m-1$ 维形心，是它的所有端顶点的平均点．$m-2$ 维形心，是分别将每个成分固定在下(或上)限，然后找出其余 $m-1$ 个成分变化的所有端顶点，再对这些端顶点求平均点．依此类推，可得各维的凸多面体形心．

例 1　设有4种成分的配料试验，限制条件为

$$0.4 \leqslant x_1 \leqslant 0.6,\ 0.1 \leqslant x_2 \leqslant 0.5,$$
$$0.1 \leqslant x_3 \leqslant 0.5,\ 0.02 \leqslant x_4 \leqslant 0.08;\ \sum x_i = 1.$$

要求设计配料试验方案．

解　列出 $m \times 2^{m-1} = 32$ 个成分水平组合，如表 6-1 所示．

通过筛选，只有 9,10,13,14,17,18,21,22 点号符合约束条件．因此，只有 8 个端顶点．这 8 个端顶点所组成的各阶形心，如表 6-2 所示．

表 6-1

点号	成分				筛选条件	
	x_1	x_2	x_3	x_4	$\sum x_i=1$	$a_i \leqslant x_i \leqslant b_i$
1	0.4	0.1	0.1			×
2	0.4	0.1	0.5			×
3	0.4	0.5	0.1			×
4	0.4	0.5	0.5		×	
5	0.6	0.1	0.1			×
6	0.6	0.1	0.5		×	
7	0.6	0.5	0.1		×	
8	0.6	0.5	0.5		×	
9	0.4	0.1	0.48	0.02		0
10	0.4	0.1	0.42	0.08		0
11	0.4	0.5		0.02		×
12	0.4	0.5		0.08		×
13	0.6	0.1	0.28	0.02		0
14	0.6	0.1	0.22	0.08		0
15	0.6	0.5		0.02		×
16	0.6	0.5		0.08		×
17	0.4	0.48	0.1	0.02		0
18	0.4	0.42	0.1	0.08		0
19	0.4		0.5	0.02		×
20	0.4		0.5	0.08		×
21	0.6	0.28	0.1	0.02		0
22	0.6	0.22	0.1	0.08		0
23	0.6		0.5	0.02		×
24	0.6		0.5	0.08		×
25		0.1	0.1	0.02		×
26	0.1	0.1	0.08			×
27	0.1	0.5	0.02			×
28	0.1	0.5	0.08			×
29	0.5	0.1	0.02			×
30	0.5	0.1	0.08			×
31	0.5	0.5	0.02		×	
32	0.5	0.5	0.08		×	

表 6-2

形心号	x_1	x_2	x_3	x_4	维数	端顶点
1	0.5	0.225	0.225	0.05	3	9,10,13,14,17,18,21,22
2	0.4	0.275	0.275	0.05	2	9,10,17,18
3	0.6	0.175	0.175	0.05	2	13,14,21,22
4	0.5	0.1	0.35	0.05	2	9,10,13,14
5	0.5	0.35	0.10	0.05	2	17,18,21,22
6	0.5	0.24	0.24	0.02	2	9,13,17,21
7	0.5	0.21	0.21	0.08	2	10,14,18,22

这样,由上述 8 个端顶点和 7 个形心点,共 15 个点,组成本例的端顶点设计的试验方案.

2. 由对称单纯形设计点的线性变换所得的设计

设$(x_{1j},x_{2j},\cdots,x_{mj}),j=1,2,\cdots,N$ 是由不带上下限限制所给出的对称单纯形设计点. 令 $b=\max\limits_{i,j}x_{ij},a=\min\limits_{i,j}x_{ij}$. 现对其中 p 个分量作线性变换:

$$u_{ij}=\frac{a_ib-b_ia}{b-a}+\frac{b_i-a_i}{b-a}x_{ij}\qquad(i=1,2,\cdots,p,j=1,2,\cdots,N).\qquad(6\text{-}19)$$

显然,当 $x_{ij}=a$ 时,$u_{ij}=a_i$;当 $x_{ij}=b$ 时,$u_{ij}=b_i$;当 $a\leqslant x_{ij}\leqslant b$ 时,$a_i\leqslant u_{ij}\leqslant b_i$. 也就是说 u_{ij}落在上下限 a_i,b_i 之间. 余下 $m-p$ 个成分 $u_{p+1,j},\cdots,u_{mj}$可自由在 $a_j\leqslant u_{ij}\leqslant b_i(i=p+1,\cdots,m)$中选取,使 $\sum\limits_{i=1}^{m}u_{ij}=1$. 这样,就能得到有限制的配料设计.

例如,$u_{p+1,j},u_{p+2,j},\cdots,u_{mj}$ 可选择为

$$u_{kj}=\begin{cases}\dfrac{1-\sum\limits_{i=1}^{p}u_{ij}}{1-\sum\limits_{i=1}^{p}x_{ij}} & (\sum\limits_{i=1}^{p}x_{ij}<1),\\[2ex] \dfrac{1-\sum\limits_{i=1}^{p}u_{ij}}{m-p} & (\sum\limits_{i=1}^{p}x_{ij}=1),\end{cases}$$

$$k=p+1,p+2,\cdots,m.$$

上面得到的 u_{kj} 不一定满足 $a_k\leqslant u_{kj}\leqslant b_k$ 条件,这时可将该点删除.

当 $p=m-1$ 时,$u_{mj}=1-\sum\limits_{i=1}^{m-1}u_{ij}$ 完全确定. 为使 u_{mj} 落在$[a_m,b_m]$区间中的机会大一些,可对区间长度 $b_i-a_i(i=1,2,\cdots,m)$排队,把较小的 $m-1$ 成分作线性变换.

对于有限制的配料试验,一般也可使用谢菲多项式模型,统计分析则可用回归分析法. 这里就不再赘述.

参 考 文 献

1 项可风,吴启光.试验设计与数据分析.上海:上海科学技术出版社,1989.

2 关颖男.混料试验设计.上海:上海科学技术出版社,1990.

3 中国科学院数学研究所概率统计室.常用数理统计表.北京:科学出版社,1974.

·随机数学卷·

第4篇

抽样调查

编　者　冯士雍
审校者　邹国华

目　录

引　　言

抽样调查也称样本调查,是一种重要的非全面调查方法.它按一定程序从所研究对象的全体(总体)中抽取一部分(样本)进行调查或观测,再根据所获得的样本数据对总体的一定目标量(未知参数)作出推断,例如估计等.

抽样调查是数理统计中两个具体研究样本获得方法的分支学科之一,与另一个分支学科——试验设计不同的是,抽样调查涉及的总体是实际存在的(而且通常可以假定为有限的),而不是一种抽象的、假想的总体.与数理统计其他分支学科所不同的是,抽样调查所涉及的样本大多是复杂的,而不是简单的诸如独立同分布样本.

抽样调查是统计学中发展与应用最早的分支学科之一.1895年在瑞士伯尔尼召开的国际统计学会第五次大会上,凯尔(A.N.Kiaer)正式提出使用代表性样本调查方法来代替全面调查的建议,许多学者以此作为抽样调查历史的开端.现代抽样理论主要是在20世纪30年代中叶,特别是在第二次世界大战以后逐渐发展起来的.

抽样调查有花费少、适时性强两个基本特点,是当今世界各国获取统计资料的一种最重要的手段,它在社会与经济、人口与健康、资源与环境以及现代管理等许多领域中都有广泛的应用,起着极其重要的作用.

1　基本概念与问题的提法

1.1　总体与样本

1.1.1　总体、抽样单元与抽样框

总体就是所研究的也即进行调查的对象的全体.例如在全国儿童情况调查中,全国所有0~14岁的儿童就构成调查的总体.调查目的是为了得到这个总体的某些目标量的估计,例如全国儿童总数、性别比例,学龄儿童的在校率等.

总体是由个体组成的,作抽样调查时只能从总体中抽取一部分个体进行调查,这部分个体就构成样本.根据被调查的样本数据,即可对总体的目标量进行估计.

总体可以是有限的,即由有限个个体所组成,也可以是无限的,即所包含的个体数量有无限多个.就抽样理论而言,总可以将总体限定为有限的,因为总可以将它划分为互不重叠而又有穷尽的有限个部分,每个这样的部分称为**抽样单元**.例如在粮食农药污染调查中,调查的对象是粮食,若按颗粒计,它的数量可以认为是无

限的.但如果将粮食按其储藏的形式,分成各种包装,甚至仓库,则每个包装或每个仓库就是一个抽样单元,而它们的数量则是有限的.抽样单元也常简称为单元.

为了抽样的方便,需要一份包含所有抽样单元的名册、清单或地图,称之为**抽样框**.在抽样框中,每个抽样单元被编上一个号码,由此可以按一定随机化程序进行抽样.在抽样后,也可根据抽样框中其他资料找到被抽中的抽样单元,从而对其实施调查.

1.1.2 样本、抽样与概率抽样

样本是总体的一部分,也是由个体或抽样单元组成的.从总体中抽取样本的过程即是**抽样**.抽样可分为概率抽样与非概率抽样两大类.**非概率抽样**的特征是样本的抽选是根据主观判断,有目的有意识地或根据操作方便的原则进行的,这种抽样效果的好坏在很大程度上依赖于抽样者的主观判断能力和经验,不能估计抽样误差,也不能从概率意义上保证推断的准确性.

概率抽样也称随机抽样,它有如下基本特点:

(1) 能够确切地定义(或区分)不同的样本,即能够明确表明一个样本包含哪些个体(或抽样单元);

(2) 对每个可能的样本都赋予一个被抽到的概率,或等价地对总体中的每个抽样单元赋予一个被抽到样本中去的概率;

(3) 通过某种严格的随机化程序从总体中抽取样本,使这个样本被抽中的概率等于所赋予的概率;

(4) 从样本估计总体目标量时需与上述抽样概率相联系.

概率抽样最大的优点是可以估计抽样误差,获得估计的精度,在抽样过程中避免了人为的干扰和偏差,因此概率抽样是最科学、应用最广泛的抽样方法.下面只讨论概率抽样.

样本中包含的抽样单元数 n 称为**样本量**,在复杂抽样中,这里的抽样单元数往往指的是基本抽样单元数.样本量 n 与总体单元总数 N(N 通常已知)之比 $f=n/N$ 称为**抽样比**.

从总体中抽取样本有许多不同的形式,从而构成许多不同的抽样方法.样本中的 n 个单元可以从总体中逐个抽取,也可以一次同时抽取,前者称为逐个抽取方法,而后者称为全样本方法.在逐个抽取时,每次被抽到的单元可以放回,也可以不放回总体之中去,前者称为放回抽样,后者称为不放回抽样.全样本抽样是一种不放回抽样.在样本抽取过程中,总体(有时也指子总体)中的每个单元被抽中的概率可能相等,也可能不相等,前者称为等概率抽样,后者称为不等概率抽样.

1.2 总体目标量及其估计

1.2.1 总体目标量的分类

每项调查都有其特定的内容和目的.抽样调查的目的就是通过样本对**总体目

标量进行估计.最常见的总体目标量有以下几种类型:

(1) **总体总量**,也称总体总和.例如全国0~14岁儿童总数,某市商业零售总额等.

(2) **总体均值**或总体平均数.例如居民平均每年用于服装消费的费用,户平均居住面积和平均收入等.

(3) **总体比例**,即总体中具有某种特征的个体在全体中的比例.例如儿童在总人口中的比例,患某种疾病的人在总人群中的比例(即患病率),人们对某种意见的赞成比例等.

(4) **总体比值**,即总体中两个指标的总量或均值之比值.例如家庭中平均用于食品支出的费用在平均总支出费用中所占的比重,学龄儿童在校率等.

(5) 总体分位数.例如我国成年男性身高、胸围等人体尺寸的5%,50%,95%分位数等.

上述五种总体目标量中的前四种彼此之间都有不同程度的内在联系.记 $\mathscr{Y}$ 为总体的某个调查指标,N 个单元的指标值为 $Y_1, Y_2, \cdots, Y_N$.则总体总量

$$Y = \sum_{i=1}^{N} Y_i \tag{1-1}$$

与总体均值

$$\bar{Y} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} Y_i = \frac{Y}{N} \tag{1-2}$$

只相差一个已知常数 N.而若令

$$Y_i = \begin{cases} 1 & (\text{若总体中第 } i \text{ 个单元具有所考虑的特征}), \\ 0 & (\text{若总体中第 } i \text{ 个单元不具有所考虑的特征}), \end{cases} \tag{1-3}$$

则总体中具有这种单元的总数 $A = Y$,比例 $P = \bar{Y}$.

总体中两个不同指标的总量或均值之比

$$R = \frac{Y}{X} = \frac{\bar{Y}}{\bar{X}} \tag{1-4}$$

有别于比例 P,因为式(1-4)中的 X(或 $\bar{X}$)与 Y(或 $\bar{Y}$)一样,也是需要根据样本来估计的.

1.2.2 估计量及判断其优劣的准则

设总体某个待估计的目标量即未知参数为 θ,$\hat{\theta}$是从样本得到的 θ 的估计量(简称估计).对于一个具体样本,由于 θ 未知,估计值的实际误差是不可知的.通常用来判断一个估计量 $\hat{\theta}$的优劣的数量指标是它的**均方误差** $\mathrm{MSE}(\hat{\theta})$,

$$\mathrm{MSE}(\hat{\theta}) = E(\hat{\theta} - \theta)^2, \tag{1-5}$$

其中 E 表示对所有可能样本取平均.均方误差可以分解成两个部分:

$$\mathrm{MSE}(\hat{\theta}) = (E(\hat{\theta}) - \theta)^2 + E(\hat{\theta} - E(\hat{\theta}))^2 \overset{\text{def}}{=\!=} (B(\hat{\theta}))^2 + V(\hat{\theta}), \tag{1-6}$$

其中 $B(\hat{\theta})$ 称为 $\hat{\theta}$的**偏倚**;$V(\hat{\theta})$ 称为 $\hat{\theta}$的**方差**.偏倚为零的估计量称为**无偏估计**

量.无偏估计量的均方误差即是它的方差.

均方误差小的估计量为优;对于无偏估计量,则是方差小的估计量为优.而对于有偏估计量,首先要求它的偏倚与方差当样本量 $n \to \infty$ 时都趋于0(此时均方误差也趋于0),且偏倚趋于0的速度比均方误差的平方根趋于0的速度更快,即要求

$$\lim_{n \to \infty} \frac{E(\hat{\theta}) - \theta}{\sqrt{\mathrm{MSE}(\hat{\theta})}} = 0, \tag{1-7}$$

满足式(1-7)的估计量称为**可用估计量**.对于可用估计量,只要 n 足够大,它的优劣也取决于它的方差 $V(\hat{\theta})$,或它的标准差 $S(\hat{\theta}) \xlongequal{\text{def}} \sqrt{V(\hat{\theta})}$,后者通常也称为 $\hat{\theta}$ 的标准误(差).

1.2.3 误差限与置信水平

估计量的精度通常也用误差限来表示.所谓误差限即是在概率意义下的最大绝对误差或相对误差.这里的概率即是置信水平,也称为置信度.确切地说,置信水平为 $1-\alpha$ 的**绝对误差限** d 满足

$$P(|\hat{\theta} - \theta| \leqslant d) = 1 - \alpha, \tag{1-8}$$

而置信水平为 $1-\alpha$ 的**相对误差限** r 满足

$$P\left(\frac{|\hat{\theta} - \theta|}{\theta} \leqslant r\right) = 1 - \alpha. \tag{1-9}$$

在抽样调查中,由于对总体的分布通常不作任何假定,又由于样本的复杂性,因此估计量 $\hat{\theta}$ 的精确分布无法求得.但在某些一般性假定下,一定类型的复杂样本常用估计量的分布来表示,在大样本时可以证明是这个分布近似正态的.至于更一般的情形,虽然没有严格的理论证明,但许多模拟结果表明也有类似的结论.据此,对于一个无偏的或可用的估计量 $\hat{\theta}$,只要 n 足够大,即可以构造给定置信水平 $1-\alpha$ 的近似置信区间:

$$\hat{\theta} \pm u_\alpha \sqrt{V(\hat{\theta})} \quad 或 \quad \hat{\theta} \pm u_\alpha S(\hat{\theta}), \tag{1-10}$$

其中 u_α 是标准正态分布的双侧 α 分位数.根据式(1-8)与式(1-9)及正态分布的性质,误差限与标准误(差)有如下关系:

$$d = u_\alpha S(\hat{\theta}), \quad r = \frac{u_\alpha S(\hat{\theta})}{\theta}. \tag{1-11}$$

1.2.4 样本量、费用与效率

抽样调查中,样本量的确定是个十分重要的问题.首先它直接与费用有关,样本量愈大,调查的费用也就愈高.其次抽样调查的精度也与样本量有关,在同种抽样方法下,样本量愈大,则抽样精度愈高,也即估计量的方差(均方误差)愈小.因此,一个好的抽样设计必须同时考虑精度与费用两个因素.一个具体的抽样设计,

应尽量做到在固定费用限制下使精度最高,或在要求达到的精度条件下,使调查总费用最省.这种设计称为最优抽样设计,它的效率最高.

1.3 非抽样误差及质量控制

1.3.1 抽样调查中的误差来源及分类

抽样调查中的误差有两大类:抽样误差与非抽样误差.**抽样误差**是由样本估计总体而产生的误差.只要是抽样调查,这个误差是不可避免的.但是只要是概率抽样,抽样误差是可以计量并得到控制的.上面讨论的估计量的均方误差、方差或标准误差都可以用来表示抽样误差.由于它们主要与样本量有关,因此可以通过样本量来控制抽样误差的大小.

抽样调查中的另一类误差是**非抽样误差**,它们不是由于抽样引起的.非抽样误差包括抽样框误差、不回答误差及计量误差三种.抽样框误差是由不完善的抽样框引起的.这主要是因为遗漏或重复,遗漏的单元不可能被抽到样本中来,而重复的单元被抽中的概率又比其他单元大.不完善的抽样框又使总体大小 N 的数值不确切,从而会高估或低估了总体总量.不回答误差也称为无响应误差,它是由于被抽中的单元或找不到,或拒绝回答等造成的样本数据缺失而引起的误差.计量误差是指由于所得的样本数据与样本单元的指标真值不一致而引起的误差,如调查误差等.非抽样误差不仅对于抽样调查,而且在一切非全面调查以至全面调查中都是存在的.

1.3.2 抽样调查中的质量控制

抽样调查中的质量控制主要是对误差的控制.抽样误差可以通过科学而周密的抽样设计(包括抽样方法与样本量的确定)来控制.与抽样误差不同的是,非抽样误差不能通过增加样本量而得到控制,因而它对调查质量的影响非常大.以下针对抽样调查实施过程中的几个主要环节,提出为减少非抽样误差,保证调查质量的几条措施.

(1) 正确界定调查对象,明确总体范围,选用合适的抽样框.调查对象及总体的确定的重要性是不言而喻的,关键是如何确定一个既完整又适用的抽样框.若找不到有关基本单元的抽样框,则应考虑采用多阶抽样(见第5章).当一个抽样框不能覆盖总体时,应考虑采用两个或多个抽样框.

(2) 完善调查方法,尽可能控制计量误差,减少无回答的现象.例如若调查采用问卷形式,则调查表的合理设计是至关重要的.

(3) 重视调查员的培训.培训内容包括样本的抽取原则与方法(特别是多阶抽样中的最基层的一、二阶抽样),调查指标的理解与解释以及调查中的具体实施方法等.

(4) 制定样本数据的审核、编码与录入过程中的一系列质量保证措施.

2 简单随机抽样

2.1 简单估计量及其性质

2.1.1 定义及实施方法

定义1 从总体N个单元中,一次抽取n个单元,若全部可能的$\binom{N}{n}$种不同的结果(样本)被抽到的概率都等于$\frac{1}{\binom{N}{n}}$,则称这种抽样为不放回**简单随机抽样**.

按定义1,不放回简单随机抽样实施起来较为复杂,为此可采用其等价的定义2.

定义2 从总体N个单元中,逐个不放回地抽取单元.每次抽取到尚未在样本(未入样)中的任何一个单元的概率都相等,直到抽足n个单元为止,则称这种抽样为不放回简单随机抽样.

简单随机抽样也可以考虑放回情形,为此有如下定义:

定义3 从总体N个单元中抽取一个单元,每个单元被抽到的概率都为$1/N$,将被抽到的单元(经观测后)放回总体;重复上述过程n次.这种抽样称为放回简单随机抽样.

放回与不放回简单随机抽样都是等概率抽样,在实施时需要采用$1\sim N$范围内的随机数:将总体N个单元编上1至N的号码,产生1个$1\sim N$范围内的随机数,该随机数所对应号码的单元被抽中.在逐个不放回抽样中,若同一号码的随机数重复出现,则相应的单元只计一次.随机数可借用随机数骰子、随机数表或计算机(器)产生的(伪)随机数发生器产生.本篇最后附有一种随机数表.

在抽样调查文献中,除非特别声明,简单随机抽样一般都是指不放回的.

2.1.2 均值(或总量)的简单估计

对于简单随机抽样,总体均值$\bar{Y}$可用样本均值

$$\bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i$$

来估计,总体总量Y可用$N\bar{y}$来估计.这种估计(量)称为简单**估计(量)**.

定理1 对于简单随机抽样,记$y_1,y_2,\cdots,y_n$为样本观测值,$\bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i$为样本均值,$s^2=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2$为样本方差,则作为总体均值$\bar{Y}$的简单估计$\bar{y}$,有如下性质:

1° $\bar{y}$是无偏的,即

$$E(\bar{y}) = \bar{Y};$$

2° $$V(\bar{y}) = \frac{N-n}{nN}S^2 = \frac{1-f}{n}S^2, \tag{2-1}$$

其中

$$S^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(Y_i - \bar{Y})^2$$

是总体方差；$f = n/N$ 是抽样比，$1 - f = \frac{N-n}{N}$ 又称为**有限总体修正系数**.

3° $V(\bar{y})$ 的一个无偏估计为

$$v(\bar{y}) = \frac{N-n}{nN}s^2 = \frac{1-f}{n}s^2. \tag{2-2}$$

根据定理 1，简单随机抽样的精度(用方差表示)，主要取决于样本量 n 与总体方差S^2 · n 愈大，S^2 愈小，则精度愈高(方差愈小)．而为了获得方差估计 $v(\bar{y})$，只要用样本方差 s^2 代替方差式(2-1) 中的 S^2 即可，因为 s^2 是 S^2 的无偏估计.

例 1 为调查某城镇成年居民的服装消费水平，在个体 $N = 5\ 443$ 个成年人中，用简单随机抽样抽得一个 $n = 36$ 的样本．对每个抽中的成年人，调查上一年中购买成衣的件数 x_i 与支出金额 y_i，如表 2-1 所示．试估计该城镇成年居民成衣平均消费水平及消费总额.

表 2-1

序号 i	成衣消费件数 x_i/件	支出金额 y_i/元	序号 i	成衣消费件数 x_i/件	支出金额 y_i/元
1	7	670	19	3	170
2	4	450	20	2	250
3	5	370	21	6	830
4	2	130	22	1	80
5	0	0	23	4	320
6	4	250	24	8	1 450
7	6	1 230	25	3	280
8	6	900	26	4	750
9	15	1 240	27	10	800
10	0	0	28	0	0
11	8	1 450	29	12	980
12	6	540	30	11	1 500
13	3	280	31	2	140
14	10	1 750	32	8	2 100
15	6	420	33	5	720
16	2	160	34	12	1 200
17	1	120	35	4	130
18	4	840	36	14	890

解 根据表 2-1 中的样本数据,计算得

$\bar{x}$ = 198/36 件 = 5.5 件, $s_x^2 = 15.8$;

$\bar{y}$ = 23 390/36 元 = 649.72 元, $s_y^2 = 304\ 803$;

$$\frac{1-f}{n} = \frac{N-n}{nN} = 0.027\ 594;$$

$v(\bar{x}) = 0.435\ 985$, $s(\bar{x}) = \sqrt{v(\bar{x})} = 0.66$ 件;

$v(\bar{y}) = 8\ 410.73$, $s(\bar{y}) = \sqrt{v(\bar{y})} = 19.71$ 元.

于是该城镇成人平均年成衣消费估计为 5.5 件,95% 置信水平的近似置信区间为5.5件 ± 1.96 × 0.66件,即[4.21 件,6.79 件];而人均用于成衣消费支出的金额估计为 679.72 元,95% 置信水平的近似置信区间为[469.97 元,829.47 元].

对于总体总量 Y 的简单估计 $\hat{Y} = N\bar{y}$,也有类似的性质.只要注意到它的方差是 $V(\bar{y})$ 的 N^2 倍即可.

2.1.3 总体比例的简单估计

若总体中的 N 个单元按某种特征可分成两类:其中 A 个单元具有这种特征,其余 $N-A$ 个单元不具有这种特征.为估计总体单元具有所考虑特征的比例 $P = A/N$,采用简单估计 $p = a/n$,其中,a 是样本中具有所考虑特征的单元数.

定理 2 若 a 是样本量为 n 的简单随机样本中具有所考虑特征的单元数,则样本比例 $p = a/n$ 是总体比例 $P = A/N$ 的无偏估计,且

$$V(p) = \frac{P(1-P)}{n}\frac{N-n}{N-1} \overset{\text{def}}{=\!=} \frac{PQ}{n}\frac{N-n}{N-1}, \tag{2-3}$$

其中 $Q = 1 - P$;而

$$v(p) = \frac{N-n}{N(n-1)}p(1-p) \overset{\text{def}}{=\!=} \frac{1-f}{n-1}pq \tag{2-4}$$

是 $V(p)$ 的一个无偏估计,其中 $q = 1 - p$.

事实上,定理2可从定理1直接推得,只要注意到 $P = \bar{Y}, S^2 = PQN/(N-1)$, $s^2 = pqn/(n-1)$ 即可.

当 n 很大时,可以用通常的方法构造 P 的置信水平为 $1-\alpha$ 的近似置信区间:

$$\left[p - u_\alpha\sqrt{\frac{1-f}{n-1}pq},\quad p + u_\alpha\sqrt{\frac{1-f}{n-1}pq}\right],$$

当 n 不是很大时,以下的置信区间更为精确:

$$\left[p - \left(u_\alpha\sqrt{\frac{1-f}{n-1}pq} + \frac{1}{2n}\right),\quad p + \left(u_\alpha\sqrt{\frac{1-f}{n-1}pq} + \frac{1}{2n}\right)\right].$$

2.1.4 放回简单随机抽样的方差及方差估计

定理 3 放回简单随机抽样样本均值 $\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$ 是总体均值 $\bar{Y}$ 的无偏估计,

$$V(\bar{y})=\frac{N-1}{N}\frac{S^2}{n}\stackrel{\text{def}}{=\!=}\frac{\sigma^2}{n},\tag{2-5}$$

其中

$$\sigma^2=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(Y_i-\bar{Y})^2=\frac{N-1}{N}S^2,$$

此时样本方差 $s^2=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2$ 是 σ^2 的无偏估计.

比较式(2-5)与式(2-1)可知,放回抽样比不放回抽样的方差大,从而精度稍差.对于一个特定抽样设计与估计量,为说明其效率,它的方差与相同样本量(不放回)简单随机抽样的简单估计量方差的比值称为它的**设计效应**,记为 deff.因此对于放回简单随机抽样,它的设计效应

$$\text{deff}=\frac{\frac{N-1}{N}}{\frac{N-n}{N}}=\frac{N-1}{N-n}\approx\frac{N}{N-n}=\frac{1}{1-f}>1.$$

deff在确定一个特定抽样设计所需要的样本量 n 时有很大作用.如果对于一定的精度要求,需要简单随机抽样的样本量为 n',则为达到相同的精度,该设计所需要的样本量 n 应是 n' 的 deff 倍.

2.2 样本量的确定

2.2.1 估计总体均值或总量时样本量的确定

在抽样调查中,样本量的确定是一个十分重要的问题,它取决于对调查精度的要求和费用的限制.对于简单随机抽样,费用函数可以看成是简单的线性函数:除固定费用外,与样本量 n 成正比.因此,这里只讨论样本量与精度之间的关系.

设 d 是在置信水平 $1-\alpha$ 下样本均值$\bar{y}$ 的绝对误差限,V 是允许的$\bar{y}$ 的最大方差,则根据式(1-11)与式(2-1),有

$$V=\left(\frac{d}{u_\alpha}\right)^2=\frac{N-n}{nN}S^2,$$

由此可解得

$$n=\frac{\left(\frac{u_\alpha S}{d}\right)^2}{1+\frac{\left(\frac{u_\alpha S}{d}\right)^2}{N}}=\frac{\frac{S^2}{V}}{1+\frac{S^2}{NV}}.\tag{2-6}$$

若令

$$n_0=\left(\frac{u_\alpha S}{d}\right)^2\qquad\text{或}\qquad n_0=\frac{S^2}{V},\tag{2-7}$$

则

$$n = \frac{n_0}{1 + \frac{n_0}{N}}. \tag{2-8}$$

在实际计算中,通常是根据式(2-7)先计算 n 的一个粗值 n_0,若 n_0/N 不很大(例如小于0.05),则就取 n_0;否则再根据式(2-8)修正 n_0.注意在运用上述公式时,必须先对总体方差进行估计,例如采用历史数据或根据试调查的结果确定.

如果精度要求是以相对误差限 r 或最大允许变异系数 C 来表示的,则相当于式(2-7)的是

$$n_0 = \left(\frac{u_\alpha S}{r\bar{Y}}\right)^2 \quad 或 \quad n_0 = \frac{1}{C^2}\left(\frac{S}{\bar{Y}}\right)^2, \tag{2-9}$$

其中 $S/\bar{Y}$ 是总体的变异系数.当 n_0/N 不能忽略时,也应根据式(2-8),对 n_0 进行修正.

2.2.2 估计总体比例时样本量的确定

若 d 是样本比例 p 在置信水平 $1-\alpha$ 下的绝对误差限,则根据式(2-6)及 $S^2 = \frac{PQN}{N-1}$,可得

$$n = \frac{\frac{u_\alpha^2 PQ}{d^2}}{1 + \frac{1}{N}\left(\frac{u_\alpha^2 PQ}{d^2} - 1\right)}. \tag{2-10}$$

若令

$$n_0 = \frac{u_\alpha^2 PQ}{d^2}, \tag{2-11}$$

则

$$n = \frac{n_0}{1 + \frac{n_0 - 1}{N}}. \tag{2-12}$$

由于 P 未知,故应事先对 P 予以估计.事实上只要 P 不是很接近于0或1,PQ 可用其最大值0.25(当 $P = Q = 0.5$ 时)代替,从而得到一个较保守的 n 值.

若 r 是 p 在置信水平 $1-\alpha$ 下的相对误差限,则

$$n = \frac{\frac{u_\alpha^2 Q}{r^2 P}}{1 + \frac{1}{N}\left(\frac{u_\alpha^2 Q}{r^2 P} - 1\right)}. \tag{2-13}$$

此时可令

$$n_0 = \frac{u_\alpha^2 q_0}{r^2 p_0}, \tag{2-14}$$

其中 p_0 是 P 的一个初步估计,$q_0 = 1 - p_0$.若 n_0/N 不太小,则同样用式(2-12)对

n_0 进行修正.

2.3　比估计量与回归估计量

2.3.1　比估计量及其基本性质

如果每个单元除调查指标 $\mathscr{Y}$ 外,还有另一个指标 $\mathscr{X}$ 可以利用,而且 $\mathscr{Y}$ 与 $\mathscr{X}$ 存在一定的比例关系或相关关系,并且 $\overline{X}$(或 X)已知,则可以利用**辅助变量** $\mathscr{X}$ 的信息构造比估计量或回归估计量,以提高估计的精度.

定义 4　对于简单随机抽样,总体均值 $\overline{Y}$ 和总量 Y 的**比估计量**分别定义为

$$\bar{y}_R = \frac{\bar{y}}{\bar{x}}\overline{X}, \quad \hat{Y}_R = \frac{\bar{y}}{\bar{x}}X = N\bar{y}_R, \tag{2-15}$$

其中 $\bar{y}$, $\bar{x}$ 分别是样本中 y_i 与 x_i 的均值;$\overline{X}$, X 分别是 X_i 的总体均值与总量.

有时,需估计的目标量就是总体的两个均值或总量之比值:

$$R = \frac{\overline{Y}}{\overline{X}} = \frac{Y}{X},$$

此时,对 R 的估计可取为

$$\hat{R} = \frac{\bar{y}}{\bar{x}}. \tag{2-16}$$

$\hat{R}$ 通常称为比值的估计.由于 $\bar{y}_R$, $\hat{Y}_R$ 及 $\hat{R}$ 三者之间都只相差一个常数,故在研究它们性质时,按照方便的原则,可选用一种形式进行讨论,通称为比估计.

定理 4　对于简单随机抽样,比估计量 $\hat{R}$ 是有偏的,其偏倚

$$B(\hat{R}) = \frac{1-f}{n}R(C_x^2 - C_{yx}) + o\left(\frac{1}{n^2}\right), \tag{2-17}$$

其中

$$C_x^2 = \frac{S_x^2}{\overline{X}^2}, \quad C_{yx} = \frac{S_{yx}}{\overline{Y}\ \overline{X}} = \rho\frac{S_yS_x}{\overline{Y}\ \overline{X}}$$

分别是 X_i 的相对方差及 X_i 与 Y_i 的相对协方差,其中 ρ 是 x_i 与 y_i 的相关系数.

$\hat{R}$ 的均方误差

$$\text{MSE}(\hat{R}) = \frac{1-f}{n\overline{X}^2}\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(Y_i - RX_i)^2 + o\left(\frac{1}{n^2}\right). \tag{2-18}$$

定理 4 表明:$\hat{R}$ 尽管是有偏的,但是可用的,因为当 n 趋于无穷大时,$B(\hat{R})$ 与 $\text{MSE}(\hat{R})$ 都趋于零,且 $B(\hat{R})$ 趋于零的速度比 $\sqrt{\text{MSE}(\hat{R})}$ 趋于零的速度更快.

当 n 足够大时,$\hat{R}$ 的均方误差与方差近似为:

$$V(\hat{R}) \approx \text{MSE}(\hat{R}) \approx \frac{1-f}{n\overline{X}^2}\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(Y_i - RX_i)^2$$

$$= \frac{1-f}{n\bar{X}^2}(S_y^2 + R^2S_x^2 - 2RS_{yx})$$

$$= \frac{1-f}{n\bar{X}^2}(S_y^2 + R^2S_x^2 - 2R\rho S_yS_x). \tag{2-19}$$

以下两个估计量都可用来估计 $V(\hat{R})$:

$$v_1(\hat{R}) = \frac{1-f}{n\bar{X}^2}\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{R}x_i)^2$$

$$= \frac{1-f}{n\bar{X}^2}(s_y^2 + \hat{R}^2s_x^2 - 2\hat{R}s_{yx}), \tag{2-20}$$

$$v_2(\hat{R}) = \frac{1-f}{n\bar{x}^2}\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{R}x_i)^2$$

$$= \frac{1-f}{n\bar{x}^2}(s_y^2 + \hat{R}^2s_x^2 - 2\hat{R}s_{yx}), \tag{2-21}$$

其中 s_y^2, s_x^2, s_{yx} 分别是样本方差与协方差. $v_1(\hat{R})$ 与 $v_2(\hat{R})$ 都不是无偏的,但当 n 足够大时是近似无偏的$\left(\text{偏倚的阶都为 } o\left(\frac{1}{n^2}\right)\right)$.

2.3.2　回归估计量及其基本性质

若 $\mathscr{Y}$ 对 $\mathscr{X}$ 的理论回归直线不通过原点,则为了进一步提高精度,可采用回归估计.

定义 5　对于简单随机抽样,总体均值 $\bar{Y}$ 和总量 Y 的**回归估计量**分别定义为

$$\bar{y}_{lr} = \bar{y} + \beta(\bar{X} - \bar{x}), \quad \hat{Y}_{lr} = N\bar{y}_{lr}, \tag{2-22}$$

其中 β 可以是设定常数,也可以是由样本计算的某个统计量.

定理 5　若 β_0 是设定常数,则回归估计量

$$\bar{y}_{lr} = \hat{\bar{Y}} + \beta_0(\bar{X} - \bar{x}) \tag{2-23}$$

是 $\bar{Y}$ 的无偏估计,且

$$V(\bar{y}_{lr}) = \frac{1-f}{n}(S_y^2 + \beta_0^2S_x^2 - 2\beta_0S_{yx}). \tag{2-24}$$

当 β_0 取 Y_i 对 X_i 的总体回归系数

$$B = \frac{S_{yx}}{S_x^2} = \frac{\sum_{i=1}^{N}(Y_i - \bar{Y})(X_i - \bar{X})}{\sum_{i=1}^{N}(X_i - \bar{X})^2}$$

时, $V(\bar{y}_{lr})$ 达到极小值 $\frac{1-f}{n}S_y^2(1-\rho^2)$.

注意,简单估计 $\bar{y}$ 是 $\bar{y}_{lr}$ 当 $\beta_0 = 0$ 的特殊情形. $\beta_0 = 1$ 时的回归估计(量)也称为**差估计(量)**.

在 β 由样本确定的情形中,若取 $\beta = \bar{y}/\bar{x}$,回归估计即是比估计,最常用的情形是 β 取样本回归系数 b. 对此有如下定理.

定理 6 对于简单随机抽样，若 b 是 y_i 对 x_i 的样本回归系数，即

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2},$$

则回归估计量

$$\bar{y}_{lr} = \bar{y} + b(\bar{X} - \bar{x}) \tag{2-25}$$

具有以下性质：

1° $\bar{y}_{lr}$ 是有偏的，且偏倚

$$B(\bar{y}_{lr}) = E(\bar{y}_{lr}) - \bar{Y}$$

$$= -\frac{1-f}{(n-1)S_x^2}\frac{\sum_{i=1}^{N}\epsilon_i(X_i - \bar{X})^2}{N-1} + o\left(\frac{1}{n^{3/2}}\right), \tag{2-26}$$

其中 $\epsilon_i = Y_i - \bar{Y} - B(X_i - \bar{X})$，$B$ 是 Y_i 对 X_i 的总体回归系数；

2° $\mathrm{MSE}(\bar{y}_{lr}) = \frac{1-f}{n}S_y^2(1-\rho^2) + o\left(\frac{1}{n^{3/2}}\right)$； (2-27)

3° $E(s_e^2) \overset{\text{def}}{=\!=} E\left(\frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n}((y_i - \bar{y}) - b(x_i - \bar{x}))^2\right)$

$$= S_y^2(1-\rho^2) + o\left(\frac{1}{n^{1/2}}\right), \tag{2-28}$$

其中 s_e^2 是样本残差方差.

上面的定理表明，$\bar{y}_{lr}$ 是可用的，且当 n 大时均方误差或方差近似为 $\frac{1-f}{n}S_y^2(1-\rho^2)$，而 $\frac{1-f}{n}s_e^2$ 是它的一个近似估计.

2.3.3 比估计、回归估计与简单估计的比较

当 n 足够大时，比较比估计 $\bar{y}_R$、回归估计 $\bar{y}_{lr}$（特指 $\beta = b$ 情形）及简单估计 $\bar{y}$ 的方差可知，回归估计比简单估计与比估计都要优；面比估计优于简单估计的条件是

$$\rho > \frac{1}{2}\frac{S_x/\bar{X}}{S_y/\bar{Y}}.$$

例 2 某县为估计全县小麦产量，在全县 $N = 576$ 个村中用简单随机抽样抽取 24 个村进行调查，调查时除记录小麦产量外，还记录了种植面积，具体数据如表 2-2 所示. 已知全县小麦种植面积为 14 583.733 hm²，试估计全县小麦产量 Y.

本例中 $N = 576, n = 24, 1 - f = 0.958\,33$. 调查指标为小麦产量 $\mathscr{Y}$，有辅助指标种植面积 $\mathscr{X}$ 可以利用，$X = 14\,583.733$ hm².

根据表 2-2 中的样本数据可计算：

$$\bar{y} = \frac{1}{24}\sum_{i=1}^{24} y_i = 130.625\text{t},$$

表 2-2

样本村编号 i	产量 y_i/t	种植面积 x_i/hm^2	样本村编号 i	产量 y_i/t	种植面积 x_i/hm^2
1	112.0	20.133	13	105.7	20.533
2	129.1	24.067	14	80.5	14.467
3	208.2	40.533	15	163.0	32.800
4	158.5	29.600	16	98.7	18.667
5	110.2	19.867	17	137.8	25.200
6	123.3	23.267	18	141.2	25.733
7	157.7	27.733	19	152.5	28.533
8	154.2	28.533	20	142.5	26.000
9	98.7	17.200	21	136.7	25.067
10	112.7	23.133	22	153.2	28.800
11	125.5	23.400	23	93.0	17.400
12	60.3	10.533	24	179.8	32.200

$$\bar{x} = \frac{1}{24}\sum_{i=1}^{24} x_i = 24.308\,3,$$

$$s_y^2 = \frac{1}{23}\sum_{i=1}^{24}(y_i - \bar{y})^2 = 1\,112.195\text{t}^2,$$

$$s_x^2 = \frac{1}{23}\sum_{i=1}^{24}(x_i - \bar{x})^2 = 42.214\,8(\text{hm}^2)^2,$$

$$s_{yx} = \frac{1}{23}\sum_{i=1}^{24}(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x}) = 214.205\,4\text{t}\cdot\text{hm}^2,$$

$$\hat{R} = \bar{y}/\bar{x} = 5.373\,68\text{t/hm}^2,$$

$$b = \frac{s_{yx}}{s_x^2} = 5.074\,18\text{t/hm}^2,$$

$$s_e^2 = \frac{1}{22}\left(\sum_{i=1}^{24}(y_i - \bar{y})^2 - b\sum_{i=1}^{24}(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})\right) = 26.428\text{t}^2.$$

于是全县小麦总产量 Y 的简单估计 $\hat{Y}$、比估计 $\hat{Y}_R$ 及回归估计 $\hat{Y}_{lr}$ 分别为

$$\hat{Y} = N\bar{y} = 576 \times 130.625\ \text{t} = 75\,240\ \text{t},$$

$$\hat{Y}_R = \hat{R}X = 5.373\,68 \times 145\,83.737\ \text{t} = 783\,68\text{t},$$

$$\hat{Y}_{lr} = N[\bar{y} + b(\bar{X} - \bar{x})] = 78\,194\ \text{t}.$$

而相应的方差与标准误差估计分别为

$$v(\hat{Y}) = \frac{N^2(1-f)}{n}s_y^2 = 14\,734\,308\ \text{t}^2,$$

$$s(\hat{Y}) = 3\,838.5\mathrm{t};$$

$$v(\hat{Y}_{\mathrm{R}}) = \frac{(1-f)X^2}{n\bar{x}^2}(s_y^2 + \hat{R}^2 s_x^2 - 2\hat{R}s_{yx})$$
$$= 417\,743\ \mathrm{t}^2,$$

$$s(\hat{Y}_{\mathrm{R}}) = 646.32\ \mathrm{t};$$

$$v(\hat{Y}_{\mathrm{lr}}) = \frac{N^2(1-f)}{n}s_e^2 = 350\,117\ \mathrm{t}^2,$$

$$s(\hat{Y}_{\mathrm{lr}}) = 591.7\ \mathrm{t}.$$

由此可见,比估计与回归估计的精度远高于简单估计.

3　分 层 抽 样

3.1　定　　义

3.1.1　定义与记号

定义 1　若 N 个单元组成的总体可以分成 L 个子总体,大小分别为 $N_h, h = 1, 2, \cdots, L$(N_h 皆已知,且 $\sum_{h=1}^{L} N_h = N$),则每个子总体称为层.若抽样是从每层中独立进行的,样本由各层样本组成,则称这种抽样为**分层抽样**.若每层内抽样都是简单随机抽样,则称为**分层随机抽样**.

以下用下标 h 表示层的编号,$h = 1,2,\cdots,L$;

用 Y_{h_i}, y_{h_i} 分别表示总体和样本中关于调查指标的第 h 层第 i 单元的值;

用 $W_h = N_h/N$ 表示**层权**,它是已知的;

用 $f_h = n_h/N_h$ 表示 h 层中的抽样比,其中 n_h 是第 h 层的样本量;

用 $\bar{Y}_h, S_h^2$ 分别表示第 h 层(总体)的均值与方差;

用 $\bar{y}_h, s_h^2$ 分别表示 h 层样本均值与方差.

3.1.2　分层抽样的优点

分层抽样是一种常用的抽样技术,它不仅可以对总体目标量进行估计,也可以对层的目标量进行估计,除此以外它还具有如下优点:

(1) 样本更具代表性,因各层都有样本单元,样本均匀性较好;

(2) 调查实施中的组织管理以及数据汇总比较方便.对不同层还可采用不同的抽样方法;

(3) 可以较大幅度地提高估计精度.

3.2 简单估计量及其性质

3.2.1 分层估计量的一般形式

分层抽样中,总体均值$\overline{Y}$的估计采用各层均值$\overline{Y}_h$之估计量$\widehat{\overline{Y}}_h$按层权的加权平均值,即

$$\widehat{\overline{Y}}_{st}=\sum_{h=1}^{L}W_h\widehat{\overline{Y}}_h;$$

总体总量Y的估计为

$$\widehat{Y}_{st}=N\widehat{\overline{Y}}_{st}=\sum_{h=1}^{L}N_h\widehat{\overline{Y}}_h.$$

特别地,对于分层随机抽样,$\overline{Y}$的简单估计为

$$\bar{y}_{st}=\sum_{h=1}^{L}W_h\bar{y}_h,\tag{3-1}$$

其中

$$\bar{y}_h=\frac{1}{n_h}\sum_{i=1}^{n_h}y_{hi}.$$

3.2.2 基本性质

对于一般的分层抽样,若$\widehat{\overline{Y}}_h$是$\overline{Y}_h$的无偏估计($h=1,2,\cdots,L$),则$\widehat{\overline{Y}}_{st}$是$\overline{Y}$的无偏估计,而由于不同层的抽样是相互独立的,因此又有

$$V(\widehat{\overline{Y}}_{st})=\sum_{h=1}^{L}W_h^2V(\widehat{\overline{Y}}_h).$$

定理1 对于分层随机抽样,作为$\overline{Y}$的简单估计$\bar{y}_{st}$,有

$$E(\widehat{\bar{y}}_{st})=\overline{Y},$$

$$V(\bar{y}_{st})=\sum_{h=1}^{L}\frac{W_h^2S_h^2}{n_h}(1-f_h)=\sum_{h=1}^{L}\frac{W_h^2S_h^2}{n_h}-\sum_{h=1}^{L}\frac{W_hS_h^2}{N}.\tag{3-2}$$

而$V(\bar{y}_{st})$的一个无偏估计为

$$v(\bar{y}_{st})=\sum_{h=1}^{L}\frac{W_h^2s_h^2}{n_h}(1-f_h)=\sum_{h=1}^{L}\frac{W_h^2s_h^2}{n_h}-\sum_{h=1}^{L}\frac{W_hs_h^2}{N}.\tag{3-3}$$

若需估计的目标量是总体比例P,则P的分层随机抽样的简单估计取为

$$p_{st}=\sum_{h=1}^{L}W_hp_h,\tag{3-4}$$

其中$p_h=\dfrac{a_h}{n_h}$是h层的样本比例.

定理2 对于分层随机抽样,作为P的简单估计p_{st},有

$$E(p_{st}) = P,$$

$$V(p_{st}) = \frac{1}{N^2}\sum_{h=1}^{L}\frac{N_h^2(N_h - n_h)}{N_{h-1}}\frac{P_hQ_h}{n_h}$$

$$\approx \sum_{h=1}^{L}\frac{W_h^2P_hQ_h}{n_h}(1-f_h), \tag{3-5}$$

其中 P_h 是 h 层(总体)比例, $Q_h = 1 - P_h$.

而 $V(p_{st})$ 的一个无偏估计

$$v(p_{st}) = \sum_{h=1}^{L}\frac{W_h^2p_hq_h}{n_h - 1}(1-f_h). \tag{3-6}$$

其中 $q_h = 1 - p_h$.

3.3 比例分配与最优分配

3.3.1 比例分配

分层抽样中的一个重要问题是当样本量 n 固定时,如何确定 n_h. 这就是样本量在各层的分配问题. 不同的分配,不仅影响精度,而且总的费用也会不同.

定义 2 在分层抽样中,若每层样本量 n_h 都与层大小 N_h 成正比,即

$$\frac{n_h}{N_h} = \frac{n}{N} \quad 或 \quad f_h = f \qquad (h = 1,2,\cdots,L), \tag{3-7}$$

则称样本量的这种分配为**比例分配**. 对于比例分配,有

$$\frac{n_h}{n} = \frac{N_h}{N} = W_h \qquad (h = 1,2,\cdots,L). \tag{3-8}$$

对于比例分配的分层随机抽样,有

$$\bar{y}_{st} = \sum_{h=1}^{L} W_h\bar{y}_h = \frac{1}{n}\sum_{h=1}^{L}\sum_{i=1}^{n_h} y_{hi} = \bar{y},$$

$$\hat{Y}_{st} = N\bar{y}_{st} = \frac{N}{n}\sum_{h=1}^{L}\sum_{i=1}^{n_h} y_{hi}.$$

注意,在这两个无偏估计量形式中每个样本观测值的权是相等的,因此比例分配的分层随机样本与简单随机样本一样都是**自加权样本**.

比例分配时,估计量的方差有如下比较简单的形式:

$$V_{prop}(\bar{y}_{st}) = \frac{1-f}{n}\sum_{h=1}^{L} W_hS_h^2. \tag{3-9}$$

3.3.2 最优分配

定义 3 在分层随机抽样中,对于给定的总费用,使 $V(\bar{y}_{st})$ 达到最小;或对于给定的估计量方差 V,使总费用最小的各层样本量的分配称为**最优分配**.

假定费用函数为最简单的线性形式:

$$C_T = c_0 + \sum_{h=1}^{L} c_h n_h, \tag{3-10}$$

其中 C_T 是总费用；c_0 是与单元抽取量无关的组织宣传等固定费用；c_h 是 h 层中抽取一个单元的平均费用，则有下面的定理.

定理 3　对于分层随机抽样，若费用函数是简单线性的式(3-10)，则最优分配为

$$\frac{n_h}{n} = \frac{\dfrac{W_h S_h}{\sqrt{c_h}}}{\sum\limits_{h=1}^{L} \dfrac{W_h S_h}{\sqrt{c_h}}} = \frac{\dfrac{N_h S_h}{\sqrt{c_h}}}{\sum\limits_{h=1}^{L} \dfrac{N_h S_h}{\sqrt{c_h}}} \quad (h = 1,2,\cdots,L). \tag{3-11}$$

这表明，层愈大，层内变异愈大，而该层抽样的单位费用愈小，则该层的抽样就应该愈多.

当不考虑 c_h 的差别时，式(3-11)成为

$$\frac{n_h}{n} = \frac{W_h S_h}{\sum\limits_{h=1}^{L} W_h S_h} = \frac{N_h S_h}{\sum\limits_{h=1}^{L} N_h S_h} \quad (h = 1,2,\cdots,L). \tag{3-12}$$

这种简单形式的最优分配称为**奈曼(J. Neyman)分配**. 在此情形，所能达到的最小方差为

$$V_{opt}(\bar{y}_{st}) = \frac{\left(\sum\limits_{h=1}^{L} W_h S_h\right)^2}{n} - \frac{\sum\limits_{h=1}^{L} W_h S_h^2}{N}. \tag{3-13}$$

3.3.3　分层随机抽样在精度上的得益

采用分层抽样的主要理由之一是，分层一般地说能使方差减小，从而在精度上有所获益，当然明显不合理的样本量分配除外. 这可由最优分配(奈曼分配情形)、比例分配与相同样本量的简单随机抽样的精度的比较中看出. 根据式(2-1)、式(3-9)与式(3-13)，以及对总体方差的分解，可以证明，当 N_h 都比较大($1/N_h$ 可以忽略，$h = 1,2,\cdots,L$)时，简单随机抽样的方差 V_{srs} 可近似表示为

$$V_{srs} \approx V_{prop} + \frac{1-f}{n} \sum_{h=1}^{L} W_h (\bar{Y}_h - \bar{Y})^2. \tag{3-14}$$

而

$$V_{prop} = V_{opt} + \frac{1}{n} \sum_{h=1}^{L} W_h (S_h - \bar{S})^2, \tag{3-15}$$

其中

$$\bar{S} = \sum_{h=1}^{L} W_h S_h.$$

因此，有

$$V_{srs} \geqslant V_{prop} \geqslant V_{opt}. \tag{3-16}$$

这说明最优分配优于比例分配，而比例分配分层随机抽样一般地说又优于简单随机抽样. 从式(3-14)与式(3-15)两式还可看出，各层均值差异愈大，分层(用比例分配作为其代表)获得的精度得益就愈大；而各层标准差的差异愈大，采用最优分配在精度上的得益也就愈大.

3.4 分层比估计与分层回归估计

3.4.1 分别比估计与联合比估计

在分层随机抽样中，构造比估计有两种方法：一种是在各层分别先构造比估计，然后再加权(或相加)，所得估计量称为**分别比估计**；另一种是对调查指标 $\mathscr{Y}$ 及辅助指标 $\mathscr{X}$ 先求分层简单估计，再用它们构造比估计，所得估计量称为**联合比估计**.

定义 4 在分层随机抽样中，总体均值 $\bar{Y}$ 的分别比估计定义为

$$\bar{y}_{\mathrm{RS}} = \sum_{h=1}^{L} W_h \bar{y}_{\mathrm{R}h} = \sum_{h=1}^{L} W_h \frac{\bar{y}_h}{\bar{x}_h} \bar{X}_h, \tag{3-17}$$

其中 $\bar{y}_{\mathrm{R}h} = \frac{\bar{y}_h}{\bar{x}_h}\bar{X}_h$ 是 h 层中 $\bar{Y}_h$ 的比估计. $\bar{Y}$ 的联合比估计定义为

$$\bar{y}_{\mathrm{RC}} = \frac{\bar{y}_{\mathrm{st}}}{\bar{x}_{\mathrm{st}}} \bar{X} \xlongequal{\mathrm{def}} \hat{R}_{\mathrm{C}} \bar{X}, \tag{3-18}$$

其中 $\bar{y}_{\mathrm{st}} = \sum_{h=1}^{L} W_h \bar{y}_h$, $\bar{x}_{\mathrm{st}} = \sum_{h=1}^{L} W_h \bar{x}_h$.

将 $\bar{y}_{\mathrm{RS}}$ 或 $\bar{y}_{\mathrm{RC}}$ 乘上 N，即可获得总体总量 Y 的分别比估计与联合比估计.

从第 2 章定理 4 可以推得，当每一层样本量 n_h 都足够大时，分别比估计 $\bar{y}_{\mathrm{RS}}$ 是近似无偏的，且

$$\begin{aligned} V(\bar{y}_{\mathrm{RS}}) &\approx \mathrm{MSE}(\bar{y}_{\mathrm{RS}}) \\ &\approx \sum_{h=1}^{L} \frac{W_h^2(1-f_h)}{n_h}(S_{yh}^2 + R_h^2 S_{xh}^2 - 2R_h\rho_h S_{yh}S_{xh}), \end{aligned} \tag{3-19}$$

其中 S_{yh}^2, S_{xh}^2 及 ρ_h 分别是 h 层方差及相关系数；$R_h = \bar{Y}_h/\bar{X}_h$.

对于联合比估计 $\bar{y}_{\mathrm{RC}}$，只要总样本量 n 足够大，就是近似无偏的，其方差和均方误差的近似值为

$$\begin{aligned} V(\bar{y}_{\mathrm{RC}}) &\approx \mathrm{MSE}(y_{\mathrm{RC}}) \\ &\approx \sum_{h=1}^{L} \frac{W_h^2(1-f_h)}{n_h}(S_{yh}^2 + R^2 S_{xh}^2 - 2R\rho_h S_{yh}S_{xh}), \end{aligned} \tag{3-20}$$

其中 $R = Y/X$.

为估计这些方差，可用样本方差、样本相关系数(或协方差)、样本比值来代替相应的总体(或层)方差、相关系数与比值.

3.4.2 分别回归估计与联合回归估计

与分层比估计情形类似，对于分层随机样本，也可以考虑两种形式的回归估计，即分别回归估计与联合回归估计.

定义 5 在分层随机抽样中，总体均值 $\bar{Y}$ 的**分别回归估计**定义为

$$\bar{y}_{lrS} = \sum_{h=1}^{L} W_h \bar{y}_{lrh} = \sum_{h=1}^{L} W_h[\bar{y}_h + \beta_h(\bar{X}_h - \bar{x}_h)], \tag{3-21}$$

其中 $\bar{y}_{lrh} = \bar{y}_h + \beta_h(\bar{X}_h - \bar{x}_h)$ 是各层回归估计. $\bar{Y}$ 的**联合回归估计**定义为

$$\bar{y}_{lrC} = \bar{y}_{st} + \beta(\bar{X} - \bar{x}_{st}), \tag{3-22}$$

其中

$$\bar{y}_{st} = \sum_{h=1}^{L} W_h \bar{y}_h, \bar{x}_{st} = \sum_{h=1}^{L} W_h \bar{x}_h.$$

从第2章定理5与定理6可推得，当式(3-21)中的 β_h 或式(3-22)中的 β 是设定常数时，$\bar{y}_{lrS}$ 及 $\bar{y}_{lrC}$ 是无偏的，而当它们的值由样本确定时，则是有偏的. 例如对于分别回归估计，若 β_h 都采用各层样本回归系数

$$b_h = \frac{\sum_{i=1}^{n_h}(y_{hi} - \bar{y}_h)(x_{hi} - \bar{x}_h)}{\sum_{i=1}^{n_h}(x_{hi} - \bar{x}_h)^2}, \tag{3-23}$$

则 $\bar{y}_{lrS}$ 是有偏的，但只要 n_h 都足够大，其偏倚就可忽略，此时它的方差近似值为

$$V(\bar{y}_{lrS}) \approx \sum_{h=1}^{L} \frac{W_h^2(1-f_h)}{n_h} S_{yh}^2(1-\rho_h^2). \tag{3-24}$$

若 s_{eh}^2 是各层样本的残差方差，则 $V(\bar{y}_{lrS})$ 可用下式估计：

$$v(\bar{y}_{lrS}) = \sum_{h=1}^{L} \frac{W_h^2(1-f_h)}{n_h} s_{eh}^2. \tag{3-25}$$

4 不等概率抽样

4.1 适用场合及分类

4.1.1 不等概率抽样的必要性与适用场合

等概率抽样的基本出发点是将总体(或子总体，例如层)中的每个单元看做是平等的，抽样时不偏重或忽视某些特定的单元. 如果总体单元差异不是很大，那么这种处理既是合理又是简单的. 但若总体单元相差很大，则等概率抽样的效果就

不一定最好．

不等概率抽样通常用于两种情况：一种是需要估计总体总量，但总体单元规模相差很大的情况．例如为了估计一个城市的商业销售总额，对各商业网点进行调查，由于商业网点的规模差异极大，将特大型、大型商场与一般中小型商场、商店和摊位平等对待显然是不合理的．此时需要将总体中每个单元被抽到样本中的概率与其规模或大小联系起来，使大单元抽到的概率大，小单元抽到的概率小，即需要用不等概率抽样．另一种是不能直接对基本的较小单元进行抽样的情况，例如在整群抽样或多阶抽样（见第5章）时，若初级单元大小（所包含的下一级单元数目）相差很大，则常采用不等概率抽样．

不等概率抽样的主要优点是可以大大提高估计的精度、减少抽样误差．采用不等概率抽样的一个必要条件是总体中的每个单元都要有一个已知辅助量，用以确定其入样概率或两个单元同时入样的概率．例如上面例子中表示单元规模或大小的某个量．

4.1.2 不等概率抽样的主要类别

不等概率抽样按其实施方法和特性可以分成许多不同的类型．

按抽样过程中被抽到的单元是否被放回总体中去，可分为放回抽样和不放回抽样两大类．放回不等概率抽样的主要优点是实施方便，而且由于所获得的样本是相互独立的，数据处理特别简单．而不放回不等概率抽样的效率要比放回的高，不过无论是抽样的实施、还是方差估计，它都远比放回抽样要复杂．

对于不放回不等概率抽样，按其样本单元抽取方法又可分为逐个抽取法、重抽法及系统抽取法等；还可按每个单元被抽到样本的概率是否严格与其表示规模或大小的量成正比分类．

此外，不等概率抽样还可根据最终得到的样本量 n 是固定的还是随机的分类．

4.2 放回不等概率抽样

4.2.1 多项抽样与 PPS 抽样

定义 1 设总体包含 N 个单元，独立地对其进行 n 次放回抽样，在每次抽样中，抽到第 i 个单元的概率为 $Z_i, i = 1,2,\cdots,N, \sum_{i=1}^{N} Z_i = 1$. 这种抽样称为**多项抽样**．

多项抽样是一种放回不等概率抽样．这种抽样所以被称为多项抽样是因为在这种抽样中，若记总体第 i 个单元被抽中的次数为 t_i，则随机向量 $(t_1, t_2, \cdots, t_N)$ 的分布为多项分布．

如果每个单元具有一个表示其规模或大小的指标 M_i，记 $M_0 = \sum_{i=1}^{N} M_i$，则当

$$Z_i = \frac{M_i}{M_0} \qquad (i = 1,2,\cdots,N) \tag{4-1}$$

时,每次抽样中单元 i 被抽中的概率皆与其规模 M_i 成比例. 这种特殊的多项抽样称为(放回的)与规模成比例的概率抽样,简称为 **PPS** 抽样.

4.2.2 多项抽样的实施方法

1. 代码法

对于给定的一组概率 $Z_i, i = 1,2,\cdots,N$,总可以找到一个整数 M_0,使每个

$$M_i = M_0 Z_i \qquad (i = 1,2,\cdots,N)$$

都是一个整数. 对 M_i 进行累计,赋予第 i 个单元 M_i 个代码. 具体方法是赋予第1个单元的代码为 $1 \sim M_1$,赋予第2个单元的代码为 $M_1+1 \sim M_1+M_2$,依此类推,赋予最后一个单元的代码为 $\sum_{j=1}^{N-1} M_j + 1 \sim M_0$. 每次抽样产生一个 $1 \sim M_0$ 范围内的随机数,以该随机数表示的代码所对应的单元作为此次抽样被抽中的单元. 如此重复 n 次,即获得 n 个样本单元.

例1 设总体由 $N = 10$ 个单元组成,用多项抽样抽取 $n = 5$ 个单元,给定的入样概率 Z_i 如表4-1所示. 令 $M_0 = 100$,即可使每个 $M_i = M_0 Z_i$ 皆为整数. 对 M_i 累加,赋予每个单元代码,如表4-1所示.

表 4-1

i	Z_i	M_i	累计 M_i	代码
1	0.08	8	8	1 ~ 8
2	0.10	10	18	9 ~ 18
3	0.17	17	35	19 ~ 35
4	0.06	6	41	36 ~ 41
5	0.24	24	65	42 ~ 65
6	0.09	9	74	66 ~ 74
7	0.05	5	79	75 ~ 79
8	0.07	7	86	80 ~ 86
9	0.04	4	90	87 ~ 90
10	0.10	10	100	91 ~ 100
$\sum$	1.00	$M_0 = 100$		

设在 1 ~ 100 范围内产生的5个随机数分别为 24,73,49,82 及 63,则单元 3,6,5,8 及 5 被抽中,其中单元5被抽中两次.

2. 拉希里法

若 N 比较大,用代码法不甚方便. 此时令 $M^* = \max_{1 \le i \le N}\{M_i\}$,即令 M^* 为所有 M_i 中的最大值,每次抽取一个 $1 \sim N$ 范围内的随机数 i 及 $1 \sim M^*$ 范围内的随机数 m,若 $M_i \geq m$,则第 i 个单元入样;否则重抽一组 (i, m). 重复上述过程,直到抽到 n 个单元为止. 这种方法称为拉希里(Lahiri)法.

4.2.3 汉森-赫尔维茨估计量及其性质

对于多项抽样,汉森(M. H. Hansen)与赫尔维茨(W. N. Hurwitz)提出以下对总体总量 Y 的估计量:

$$\hat{Y}_{HH} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i}{z_i}. \tag{4-2}$$

定理 1 若所有的 $Z_i>0, i=1,2,\cdots,N$,则**汉森-赫尔维茨估计量** $\hat{Y}_{HH}$ 具有以下性质:

1° $E(\hat{Y}_{HH})=Y$,即它是无偏的;

2° $V(\hat{Y}_{HH}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{N} Zi\left(\frac{Y_i}{Z_i}-Y\right)^2$; (4-3)

3° 若 $n>1$,则

$$v(\hat{Y}_{HH}) = \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{y_i}{z_i}-\hat{Y}_{HH}\right)^2 \tag{4-4}$$

是 $V(\hat{Y}_{HH})$的无偏估计 .

$V(\hat{Y}_{HH})$还可表示成以下两种形式:

$$V(\hat{Y}_{HH}) = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{Y_i^2}{Z_i}-Y^2\right); \tag{4-5}$$

$$V(\hat{Y}_{HH}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N}Z_iZ_j\left(\frac{Y_i}{Z_i}-\frac{Y_j}{Z_j}\right)^2. \tag{4-6}$$

4.3 不放回不等概率抽样

4.3.1 包含概率与 πPS 抽样

由于放回抽样有可能重复抽到同一单元,因此效率稍差,也不易被实际工作者所接受,故有必要研究不放回不等概率抽样 .

在不放回不等概率抽样中,总体中每个单元被包含到样本中的概率 $\pi_i(i=1,2,\cdots,N)$及任意两个单元都包含在样本中的概率 $\pi_{ij}(i\neq j, i,j=1,2,\cdots,N)$起着十分重要的作用,它们通称为**包含概率** .

对于固定样本量 n 的不放回抽样,包含概率 π_i 与 π_{ij} 有以下性质:

1° $\sum_{i=1}^{N}\pi_i = n$;

2° $\sum_{j\neq i}^{N}\pi_{ij} = (n-1)\pi_i$;

3° $\sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N}\pi_{ij} = \frac{1}{2}n(n-1)$.

与放回的 PPS 抽样类似,对于不放回不等概率抽样,最重要的应用最广泛的是 π_i 与单元规模 M_i 成比例的情况 . 若仍记 $Z_i = M_i/M_0\left(M_0 = \sum_{i=1}^{N} M_i\right)$,上述情形即是对于每个 i,都有

$$\pi_i = nZ_i. \tag{4-7}$$

称这种不放回的与单元规模成比例的概率抽样为 πPS 抽样 .

4.3.2 霍维兹-汤普森估计量及其性质

对于不放回的不等概率抽样,霍维兹(D.G.Horvitz)与汤普森(D.J.Thompson)提出以下的对总体总量 Y 的估计量:

$$\hat{Y}_{HT} = \sum_{i=1}^{n} \frac{y_i}{\pi_i}. \tag{4-8}$$

定理2　霍维兹-汤普森估计量 $\hat{Y}_{HT}$具有如下的性质.

1° 若 $\pi_i > 0, i = 1,2,\cdots,N$,则 $\hat{Y}_{HT}$是 Y 的无偏估计,且它的方差

$$V(\hat{Y}_{HT}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1-\pi_i}{\pi_i} Y_i^2 + 2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} \frac{\pi_{ij}-\pi_i\pi_j}{\pi_i\pi_j} Y_i Y_j. \tag{4-9}$$

当 n 固定时,有

$$V(\hat{Y}_{HT}) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} (\pi_i\pi_j - \pi_{ij})\left(\frac{Y_i}{\pi_i} - \frac{Y_j}{\pi_j}\right)^2. \tag{4-10}$$

2° 若 $\pi_i > 0, \pi_{ij} > 0, i,j = 1,2,\cdots,N, i \neq j$,则

$$v(\hat{Y}_{HT}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1-\pi_i}{\pi_i^2} y_i^2 + 2\sum_{i=1}^{n}\sum_{j>i}^{n} \frac{\pi_{ij}-\pi_i\pi_j}{\pi_i\pi_j\pi_{ij}} y_i y_j \tag{4-11}$$

是 $V(\hat{Y}_{HT})$的无偏估计 . 当 n 固定时,以下的估计量也是 $V(\hat{Y}_{HT})$的无偏估计:

$$v_{YGS}(\hat{Y}_{HT}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j>i}^{n} \frac{\pi_i\pi_j - \pi_{ij}}{\pi_{ij}}\left(\frac{y_i}{\pi_i} - \frac{y_j}{\pi_j}\right)^2 \tag{4-12}$$

v_{YGS}在有的文献中称为耶茨-格伦迪-森(Yates-Grundy-Sen)估计量 .

4.3.3 几种常用的 πPS 抽样

1. 布鲁尔方法

这是一种 $n = 2$ 的严格 πPS 抽样,要求 $Z_i < 1/2, i = 1,2,\cdots,N$. 第一个样本单元按与 $Z_i(1-Z_i)/(1-2Z_i)$成比例的概率抽取,第二个样本单元是在剩下的 $N-1$ 个单元中按与 Z_j 成比例的概率抽取 . 按布鲁尔(Brewer)方法,$\pi_i = 2Z_i$,且

$$\pi_{ij} = \frac{4Z_iZ_j(1-Z_i-Z_j)}{(1-2Z_i)(1-2Z_j)}\left(1 + \sum_{i=1}^{N} \frac{Z_i}{1-2Z_i}\right). \tag{4-13}$$

2. 德宾方法

这也是一种适用于 $n = 2$ 的严格 πPS 抽样 . 仍要求 $Z_i < 1/2, i = 1,2,\cdots,N$,第

一个样本单元以概率 Z_i 抽取，设第 i 单元入样；第二个样本单元则以与 $Z_j\left(\frac{1}{1-2Z_i}+\frac{1}{1-2Z_j}\right)$ 成比例的概率抽取，事实上德宾(Durbin)方法与布鲁尔方法是等价的，π_{ij}也由式(4-13)给出．

3. 莫蒂方法

这是一种适用于 $n\geqslant 2$ 的但不是严格 πPS 抽样方法．莫蒂(Murthy)方法也是一种逐个抽取方法．第一个样本单元按 Z_i 的概率抽取，设第 i 个单元入样；第二个样本单元按 $Z_j/(1-Z_i)$的概率在其余 $N-1$ 个单元中抽取，设第 j 个单元入样；第三个样本单元则按 $Z_k/(1-Z_i-Z_j)$的概率在剩下的 $N-2$ 个单元中抽取；以此类推，直至抽足 n 个单元为止．也就是说，每次抽样都是按与当时未入样的单元大小成比例的概率抽取的，因此总的说来 $\pi_i\neq nZ_i$．由于 π_i的计算十分复杂，故对 Y 的估计采用莫蒂提出的估计量：

$$\hat{Y}_{\mathrm{M}}=\frac{\sum_{i=1}^{n}Pr(S\mid i)y_i}{Pr(S)},\tag{4-14}$$

其中 $Pr(S)$是抽中特定样本 S 的概率；$Pr(S\mid i)$是在第一次抽样抽到单元 i 的条件下，抽到 S 的条件概率．$\hat{Y}_{\mathrm{M}}$是无偏的，它的方差及方差估计也非常复杂．但当 $n=2$ 时，$\hat{Y}_{\mathrm{M}}$及 $v(\hat{Y}_{\mathrm{M}})$有如下比较简单的形式：

$$\hat{Y}_{\mathrm{M}}=\frac{1}{2-z_1-z_2}\left((1-z_2)\frac{y_1}{z_1}+(1-z_1)\frac{y_2}{z_2}\right),\tag{4-15}$$

$$v(\hat{Y}_{\mathrm{M}})=\frac{(1-z_1)(1-z_2)(1-z_1-z_2)}{(2-z_1-z_2)^2}\left(\frac{y_1}{z_1}-\frac{y_2}{z_2}\right)^2.\tag{4-16}$$

4. 拉奥-哈特利-柯克伦方法

拉奥-哈特利-柯克伦(Rao-Hartley-Cochran)方法也是一种适用于 $n>2$ 的非严格 πPS 抽样方法．将总体 N 个单元随机地分成 n 组，每组的单元数为 $N_1,N_2,\cdots,N_n$，在每组中按与 Z_i 成比例的概率抽取一个单元作为样本单元．记第 g 组抽得的单元的指标值为 y_g，相应的 Z 值为 z_g，而该组 N_g 个 Z_i 值之和记为 Z_g^*，则总体总量 Y 的估计

$$\hat{Y}_{\mathrm{RHC}}=\sum_{g=1}^{n}Z_g^*\frac{y_g}{z_g}.\tag{4-17}$$

它是无偏的，其方差

$$V(\hat{Y}_{\mathrm{RHC}})=\frac{\sum_{g=1}^{n}N_g^2-N}{N(N-1)}\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{Y_i^2}{Z_i}-Y^2\right),\tag{4-18}$$

它的一个无偏估计是

$$v(\widehat{Y}_{\mathrm{RHC}}) = \frac{\sum_{g=1}^{n} N_g^2 - N}{N^2 - \sum_{g=1}^{n} N_g^2} \sum_{g=1}^{n} Z_g^* \left(\frac{y_g}{z_g} - \widehat{Y}_{\mathrm{RHC}} \right)^2. \tag{4-19}$$

5　整群抽样与多阶抽样

5.1　定　　义

实施简单随机抽样的一个前提是需要一个可供使用的抽样框．准备一个包含总体所有个体或基本抽样单元的抽样框的工作在多数情形下或极为艰巨，或根本不可能，即使有可能，调查的实施也将十分困难，因为所抽得的样本单元往往是非常分散的．解决这种难题的办法是将总体中的个体或基本单元按地理位置或隶属关系归并成数量较少而规模较大的单元．先对这些较大单元抽样，对那些没有抽中的大单元不再进行调查．同样的思想可以再次运用在那些被抽中的大单元中，对于这些单元，或再次对其所包含的较小单元进行抽样，或对这些较小单元全部进行调查．这就是多阶抽样和整群抽样的思想．多阶抽样与整群抽样最突出的优点是实施方便、节省费用，因此在大规模抽样调查中常被使用．

定义 1　设总体由 N 个初级(抽样)单元组成，每个初级单元又由若干二级(次级)单元组成，若在总体中按一定方法抽取 n 个初级单元，对每个被抽中的初级单元再抽取若干个二级单元进行调查，则这种抽样称为**二阶抽样**或**二级抽样**．

如果每个二级单元又由更小的三级单元组成，那么在第二阶抽样后，若对每个被抽中的二级单元中的三级单元再进行抽样，则称为**三阶抽样**．以此类推，可以定义更高阶抽样．

定义 2　在二阶或多阶抽样中，若对最后一阶不再抽样，而是调查其中所包含的全部下一级抽样单元，则这种抽样称为**整群抽样**．特别地，在二阶抽样中，若对每个被抽中的初级单元调查其中所包含的全部二级单元，第二阶抽样实际上并没有进行，样本是以初级单元为群整体抽取的，这种抽样称为**一阶整群抽样**；若在三阶抽样中的第三阶抽样是以二级单元为群整体抽取的，则称为**二阶整群抽样**．以此类推，可定义更高阶的整群抽样．除非特别注明，下面的整群抽样都特指一阶整群抽样．

根据上述定义可知，(一阶或多阶)整群抽样是多阶抽样的特例，而分层抽样实际上也可看作是多阶抽样的特例．此时每个初级单元即是层，而第一阶抽样是100%抽样，层内抽样则是第二阶抽样．事实上在多阶抽样中的任何一阶上都允许进行100%抽样．

5.2 整群抽样

5.2.1 群大小相等的情形

设总体中有 N 个初级单元，每个都包含 M 个次级单元．记 Y_{ij} 及 y_{ij} 分别为总体和样本中第 i 个初级单元(群)、第 j 个次级单元的指标值．

定理1 在群大小皆为 M 的整群抽样中，若用简单随机抽样抽取 n 个群，则样本次级单元的均值

$$\bar{\bar{y}} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{M}\frac{y_{ij}}{nM} \tag{5-1}$$

是总体相应均值

$$\bar{\bar{Y}} = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}\frac{Y_{ij}}{NM}$$

的无偏估计，且

$$V(\bar{\bar{y}}) = \frac{1-f}{n}\frac{NM-1}{M^2(N-1)}S^2(1+(M-1)\rho_c)$$

$$\approx \frac{1-f}{nM}S^2(1+(M-1)\rho_c), \tag{5-2}$$

其中 $f=\frac{n}{N}=\frac{nM}{NM}$ 是抽样比；S^2 是总体方差，

$$S^2 = \frac{1}{NM-1}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}(Y_{ij}-\bar{\bar{Y}})^2;$$

ρ_c 是**群内相关(系数)**，

$$\rho_c = \frac{2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j<k}^{M}(Y_{ij}-\bar{\bar{Y}})(Y_{ik}-\bar{\bar{Y}})}{(M-1)(NM-1)S^2}$$

$$= \frac{M(N-1)S_b^2-(NM-1)S^2}{(M-1)(NM-1)S^2} \approx \frac{S_b^2-S^2}{(M-1)S^2}, \tag{5-3}$$

其中 S_b^2 是总体的群间方差，

$$S_b^2 = \frac{M}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(\bar{Y}_i-\bar{\bar{Y}})^2 \xlongequal{\text{def}} \frac{M}{N-1}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{M}\sum_{j=1}^{M}Y_{ij}-\bar{\bar{Y}}\right)^2.$$

将整群抽样的方差与简单随机抽样的方差相比较得知，整群抽样的设计效应

$$\text{deff} \approx 1+(M-1)\rho_c. \tag{5-4}$$

群内相关 ρ_c 是表示群内次级单元之间同质性的一个指标，它的取值范围是 $[-\frac{1}{M-1},1]$，除极少数特殊情形外，ρ_c 都取正值，因此一般地说，整群抽样的效率较低．为了提高效率，在进行群划分时，要使群内次级单元的差异尽可能大，而且群又不要定得太大．

方差 $V(\bar{\bar{y}})$的一个无偏估计是

$$v(\bar{\bar{y}}) = \frac{1-f}{nM}S_b^2 \tag{5-5}$$

其中 $S_b^2 = \frac{M}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\bar{y}_i - \bar{\bar{y}})^2$ 是样本的群间方差．

例1　在一次对某城市一个居民区食品消费量的调查中,以每个楼层(相当于居民小组)为群进行整群抽样．每个楼层都有 $M = 8$ 个住户,用简单随机抽样在全部 $N = 510$ 个楼层中抽取 $n = 12$ 个楼层．全部96个样本户的人均月食品消费额 y_{ij} 及按楼层的平均数 $\bar{y}_i$ 与标准差 s_i 如表5-1所示．试估计该居民区人均食品消费额的户平均值 $\bar{\bar{Y}}$,并给出其95%置信水平的置信区间．

表5-1　　单位:元

i	y_{ij}	$\bar{y}_i$	s_i
1	240,187,162,185,206,197,154,173	188.000	27.19
2	210,192,184,148,186,175,169,180	180.500	17.98
3	149,168,145,130,170,144,125,167	149.750	17.32
4	202,187,166,232,205,263,198,210	207.875	29.17
5	210,285,308,198,264,275,183,231	244.250	45.20
6	394,256,192,280,267,334,216,289	278.500	63.87
7	192,121,172,165,152,224,195,241	182.750	38.77
8	230,205,187,176,212,253,189,240	211.500	27.48
9	274,208,195,307,264,258,210,309	253.125	44.52
10	232,187,150,182,175,212,169,222	191.125	28.29
11	342,294,267,309,258,198,244,286	274.750	43.70
12	228,294,182,312,267,254,232,298	258.375	43.52

解　这是一个群相等的整群抽样,$N = 510, n = 12, M = 8, f = 0.023\,44$.
根据表5-1所列数据,可计算出 $\bar{y}_i$ 的平均数与标准差:

$$\bar{\bar{y}} = \frac{1}{12}\sum_{i=1}^{12}\bar{y}_i = 2\,620.5/12\text{元} = 218.375\text{元},$$

$$\frac{1}{12-1}\sum_{i=1}^{12}(\bar{y}_i - \bar{\bar{y}})^2 = 1\,773.272\,7\text{元}.$$

于是,

$$s_b^2 = 8 \times 1\,773.2\,727\text{元} = 14\,186.18\text{元},$$

故 $\bar{\bar{Y}}$ 的估计量 $\bar{\bar{y}}$ 的方差估计

$$v(\bar{\bar{y}}) = \frac{1-f}{nM}s_b^2 = \frac{1-0.023\,44}{12\times 8}\times 14\,186.18\text{元} = 144.308\,9\text{元},$$

$$\hat{\sigma}(\bar{\bar{y}}) = \sqrt{v(\bar{\bar{y}})} = 12.013\text{元}.$$

从而 $\bar{\bar{Y}}$ 的置信水平为95% 的近似置信限为 218.375 ± 1.96 × 12.013 元，相应置信区间为[194.83 元，241.92 元].

5.2.2 群大小不相等的情形

在多数实际问题中，群大小 M_i 是不相等的，对此情形虽然仍可对群采用简单随机抽样，但其估计量不是效率太低(当采用简单估计时，虽无偏但方差大)，就是估计较复杂，且有偏(当采用比估计时). 此时最有效的方法是对群采用放回或不放回的与群大小成比例的概率抽样，即 PPS 抽样或 πPS 抽样. 当然就实际操作而言，当采用 πPS 抽样时，最实用的方法是先将总体分层，在每层抽取两个群.

若群是按放回PPS抽样抽取的，即进行 n 次独立抽样，每次按 $Z_i = M_i/M_0, i = 1,2,\cdots,N$，($M_0 = \sum_{i=1}^{N} M_i$ 为总体中次级单元的总数) 的概率抽取第 i 个群，设观测到的群和该群的大小分别为 $y_i = \sum_{j=1}^{m_i} y_{ij}$ 与 m_i，则总体总值 Y 的汉森-赫尔维茨估计量为

$$\hat{Y}_{HH} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i}{z_i} = \frac{M_0}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i}{m_i} = M_0\,\bar{\bar{y}}\,, \tag{5-6}$$

其中

$$\bar{\bar{y}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i}{m_i} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\bar{y}_i \tag{5-7}$$

是总体(按次级单元)均值 $\bar{\bar{Y}}$ 的估计.

根据汉森-赫尔维茨估计的性质(第5章定理1)，$\hat{Y}_{HH}$与 $\bar{\bar{y}}$ 都是无偏的，且方差及方差估计(以 $\bar{\bar{y}}$ 为例)分别为

$$V(\bar{\bar{y}}) = \frac{1}{nM_0}\sum_{i=1}^{N}M_i(\bar{Y}_i - \bar{\bar{Y}})^2, \tag{5-8}$$

$$v(\bar{\bar{y}}) = \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(\bar{y}_i - \bar{\bar{y}})^2. \tag{5-9}$$

当群的抽取是用任何一种不放回的 πPS 抽样抽取时，总体总量的估计应用霍维兹-汤普森估计量 $\hat{Y}_{HT}$，它也是无偏的，其方差和方差估计与其包含概率有关.

5.2.3 估计总体比例的整群抽样

整群抽样常用于为估计总体中具有某种特征单元比例的抽样，因为在这种情况下调查本身比较容易，而且整群抽样可大大降低用于组织和旅行之类的费用. 设 $A_i(a_i)$，$P_i(p_i)$分别为总体(样本)第 i 群中具有所考察特征的次级单元数及其比例.

(1)群大小相等的情形　当群大小 M 都相等时，若采用简单随机抽样抽取 n

个群，则总体比例 P 的估计

$$p=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}p_i=\frac{1}{nM}\sum_{i=1}^{n}a_i. \tag{5-10}$$

由定理1知，p 是无偏的，且它的方差

$$V(p)=\frac{1-f}{n}\frac{\sum_{i=1}^{N}(P_i-P)^2}{N-1}. \tag{5-11}$$

$V(p)$的一个无偏估计是

$$v(p)=\frac{1-f}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(p_i-p)^2. \tag{5-12}$$

(2)群大小不相等的情形　当群大小 M_i 不相等时，除可用各种不等概率抽样外，还可对群进行简单随机抽样，P 的估计采用对群大小的比估计

$$p'=\frac{\sum_{i=1}^{n}a_i}{\sum_{i=1}^{n}m_i}. \tag{5-13}$$

当 n 足够大时，p' 是近似无偏的，且

$$V(p')\approx\frac{1-f}{n\bar{M}^2}\frac{\sum_{i=1}^{N}M_i^2(P_i-P)^2}{N-1}, \tag{5-14}$$

其中 $\bar{M}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}M_i$ 是总体群的平均大小．$V(p')$可用下式估计：

$$v(p')=\frac{1-f}{n\bar{m}^2}\frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}a_i^2+p'^2\sum_{i=1}^{n}m_i^2-2p'\sum_{i=1}^{n}a_im_i\right), \tag{5-15}$$

其中 $\bar{m}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}m_i$ 是样本群的平均大小．

5.3 二阶抽样

5.3.1 初级单元大小相等的情形

在初级单元大小相等的二阶抽样中，两阶抽样通常都采用简单随机抽样：第一阶抽样从总体 N 个初级单元中抽取 n 个初级单元，第二阶抽样从每个被抽中的初级单元(设每个包含 M 个次级单元)中抽取 m 个次级单元．在这样的问题中要考虑的主要是对总体均值的估计．

定理2　如果二阶抽样中的每一阶抽样都是简单随机的，且对每个初级单元第二阶抽样是相互独立的，则样本次级单元的均值

$$\bar{\bar{y}} = \frac{1}{nm}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} y_{ij} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\bar{y}_i \tag{5-16}$$

是总体均值

$$\bar{\bar{Y}} = \frac{1}{NM}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} Y_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\bar{Y}_i \tag{5-17}$$

的估计．它们有如下性质：

1° $E(\bar{\bar{y}}) = \bar{\bar{Y}}$；

2° $V(\bar{\bar{y}}) = \frac{1-f_1}{n}S_1^2 + \frac{1-f_2}{nm}S_2^2,$ (5-18)

其中

$$S_1^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(\bar{Y}_i - \bar{\bar{Y}})^2, \quad S_2^2 = \frac{1}{N(M-1)}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}(Y_{ij} - \bar{Y}_i)^2 \tag{5-19}$$

分别是总体初级单元间方差与初级单元内方差；$f_1 = n/N$、$f_2 = m/M$ 分别是第一、二阶抽样的抽样比．

证明上述定理，需要用到通常二步抽样中求估计量均值与方差的一般公式：

$$E(\hat{\theta}) = E_1(E_2(\hat{\theta})), \tag{5-20}$$

$$V(\hat{\theta}) = V_1(E_2(\hat{\theta})) + E_1(V_2(\hat{\theta})), \tag{5-21}$$

其中 E_1, V_1 分别为对第一阶抽样求均值与方差；E_2、V_2 分别为在固定初级单元的条件下，对第二阶抽样求均值与方差．

为估计 $V(\bar{\bar{y}})$，需要利用与式(5-19)类似形式的样本初级单元间方差 s_1^2 及初级单元内方差 s_2^2：

$$s_1^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\bar{y}_i - \bar{\bar{y}})^2, \quad s_2^2 = \frac{1}{n(m-1)}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij} - \bar{y}_i)^2. \tag{5-22}$$

虽然 s_2^2 是 S_2^2 的无偏估计，但 s_1^2 并不是 S_1^2 的无偏估计．事实上，由式(5-20)可推出

$$E(s_1^2) = S_1^2 + \frac{1-f_2}{m}S_2^2. \tag{5-23}$$

于是，有如下定理．

定理 3　对于二阶抽样，若定理 2 的条件成立，则 $V(\bar{\bar{y}})$ 的一个无偏估计是

$$v(\bar{\bar{y}}) = \frac{1-f_1}{n}s_1^2 + \frac{f_1(1-f_2)}{nm}s_2^2. \tag{5-24}$$

例2　为改进例1抽样精度，将例 1 中的整群抽样改用二阶抽样．用简单随机抽样抽取 $n=24$ 个楼层，对每个抽中的楼层再用简单随机抽样抽取 $m=4$ 户进行调查．总样本量仍为 96 户．表 5-2 所示的是用二阶抽样抽取 24 个楼层 96 户居民人均月食品消费额的资料(其中前 12 个楼层资料是从表 5-1 中随机抽得的)．试估计该居民区人均食品消费的户平均值 $\bar{\bar{Y}}$．

解　表 5-2 列出了每个楼层样本平均数 $\bar{y}_i$ 及方差 s_{2i}^2．$\bar{\bar{Y}}$ 的估计为

表 5-2 单位:元

i	y_{ij}	$\bar{y}_i$	s_{2i}^2	i	y_{ij}	$\bar{y}_i$	s_{2i}^2
1	240,162,185,197	196.00	1 071.33	13	190,162,175,202	182.25	304.25
2	192,148,186,169	173.75	389.58	14	185,201,178,238	200.50	717.67
3	168,170,144,167	162.25	149.58	15	251,230,197,221	224.75	500.25
4	187,232,205,210	208.50	343.00	16	193,208,214,186	200.25	168.25
5	210,308,198,183	224.75	3 202.25	17	238,200,195,210	210.75	368.92
6	256,280,334,216	271.50	2 433.00	18	312,258,242,225	259.25	1418.25
7	192,165,224,241	205.50	1 141.67	19	177,230,196,234	209.25	752.92
8	187,212,253,189	210.25	940.92	20	286,247,209,224	241.50	1124.33
9	208,307,258,210	245.75	2 201.58	21	228,254,205,218	226.25	430.92
10	232,182,212,169	198.75	815.58	22	287,208,197,248	235.00	1682.00
11	294,309,244,286	283.25	775.58	23	275,240,300,262	269.25	628.92
12	228,182,312,232	238.50	2 915.67	24	184,215,199,237	208.75	514.92

$$\bar{\bar{y}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\bar{y}_i = 220.270\,8\text{ 元},$$

$$s_1^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\bar{y}_i - \bar{\bar{y}})^2 = 950.271\,3\text{ 元},$$

$$s_2^2 = \frac{1}{n(m-1)}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij} - y_i)^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}s_{2i}^2 = 1\,041.305\,8\text{ 元}.$$

又

$$f_1 = n/N = 24/510 = 0.047, f_2 = m/M = 4/8 = 0.5,$$

因此,

$$v(\bar{\bar{y}}) = \frac{1-f_1}{n}s_1^2 + \frac{f_1(1-f_2)}{nm}s_2^2 = \frac{0.953}{24}\times 950.2713 + \frac{0.047\times 0.5}{24\times 4}\times 1\,041.3\,058\text{ 元} = 37.988\,6\text{ 元},$$

$$s(\bar{\bar{y}}) = \sqrt{v(\bar{\bar{y}})} = 6.163\,5\text{ 元}.$$

于是 $\bar{\bar{Y}}$ 的置信水平为95%的置信限为 $220.270\,8 \pm 1.96 \times 6.163\,5$ 元,相应的置信区间为[208.19 元,232.35 元].

5.3.2 初级单元大小不等的情形

在二阶抽样中,当初级单元大小不相等时,最有效的处理方法是第一阶抽样采用放回或不放回的不等概率抽样;第二阶抽样可采用任何一种抽样方法,通常是采用简单随机抽样 .

1. 第一阶抽样采用多项抽样的情形

这是对每个初级单元,赋予概率 $Z_i\left(\sum_{i=1}^{N} Z_i = 1\right)$,进行 n 次独立抽样,每次抽到第 i 单元的概率为 Z_i,$i=1,2,\cdots,N$,第二阶抽样则是在每个被抽中的初级单元中以某种方法抽取 m_i 个次级单元,若某个初级单元被重复抽中,则原来在第二阶抽样抽到的次级单元也都被放回,然后重新抽取 m_i 个次级单元的情形 .

在此情形,为估计总体总量 Y,应先估计被抽中的初级单元的总量 Y_i,设 $\hat{Y}_i$ 是 Y_i 的一个无偏估计;然后利用多项抽样的汉森-赫尔维茨估计量,给出 Y 的估计

$$\hat{Y}_{HH} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{\hat{Y}}{z_i}, \tag{5-25}$$

其中 z_i 是第 i 个样本初级单元相应的 Z_i 值 . $\hat{Y}_{HH}$是无偏的,其方差

$$V(\hat{Y}_{HH}) = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{N} Z_i\left(\frac{Y_i}{Z_i} - Y\right)^2 + \sum_{i=1}^{N}\frac{V_2(\hat{Y}_i)}{Z_i}\right), \tag{5-26}$$

其中 $V_2(\hat{Y}_i)$是第二阶抽样中 $\hat{Y}_i$ 的方差 . $V(\hat{Y}_{HH})$的一个无偏估计是

$$v(\hat{Y}_{HH}) = \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\hat{Y}_i}{z_i} - \hat{Y}_{HH}\right). \tag{5-27}$$

注意,方差估计量的形式与第二阶抽样方法无关 .

在实际应用中,最感兴趣的,也是最常用的情形是,第一阶抽样采用 PPS 抽样,而第二阶抽样采用等样本量(设为 m)的简单随机抽样 . 此时 $\hat{Y}_{HH}$简化为

$$\hat{Y}_{PPS} = \frac{M_0}{n}\sum_{i=1}^{n}\bar{y}_i = \frac{M_0}{nm}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} y_{ij} = M_0\,\bar{\bar{y}}\,, \tag{5-28}$$

其中

$$\bar{\bar{y}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\bar{y}_i = \frac{1}{nm}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} y_{ij}. \tag{5-29}$$

$\bar{\bar{y}}$ 也是 $\bar{\bar{Y}}$ 的无偏估计 . 从式(5-28)可知,此时样本是自加权的 . 在此情形下,$\hat{Y}_{PPS}$ 及 $\bar{\bar{y}}$ 的方差估计也极为简单:

$$v(\hat{Y}_{PPS}) = \frac{{M_0}^2}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(\bar{y}_i - \bar{\bar{y}})^2, \tag{5-30}$$

$$v(\bar{\bar{y}}) = \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(\bar{y}_i - \bar{\bar{y}})^2. \tag{5-31}$$

2. 第一阶抽样采用不放回不等概率抽样的情形

如果初级单元是按某种不放回不等概率方法抽取的,设包含概率为 π_i,π_{ij},$\hat{Y}_i$ 是 Y_i 的一个无偏估计,则总体总量 Y 的估计是如下的霍维兹-汤普森估计:

$$\hat{Y}_{HT} = \sum_{i=1}^{n}\frac{\hat{Y}_i}{\pi_i}, \tag{5-32}$$

它是无偏的，其方差为

$$V(\hat{Y}_{HT}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1-\pi_i}{\pi_i} Y_i^2 + 2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} \frac{\pi_{ij} - \pi_i\pi_j}{\pi_i\pi_j} Y_i Y_j + \sum_{i=1}^{N} \frac{V_2(\hat{Y}_i)}{\pi_i}. \tag{5-33}$$

若 $v_2(\hat{Y}_i)$ 是 $V_2(\hat{Y}_i)$ 的一个无偏估计，则以下估计量是 $V(\hat{Y}_{HT})$ 的无偏估计：

$$v_1(\hat{Y}_{HT}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1-\pi_i}{\pi_i^2} \hat{Y}_i^2 + 2\sum_{i=1}^{n}\sum_{j>i}^{n} \frac{\pi_{ij} - \pi_i\pi_j}{\pi_i\pi_j\pi_{ij}} \hat{Y}_i \hat{Y}_j + \sum_{i=1}^{n} \frac{v_2(\hat{Y}_i)}{\pi_i}. \tag{5-34}$$

当 n 固定时，以下估计量也是 $V(\hat{Y}_{HT})$ 的无偏估计：

$$v_2(\hat{Y}_{HT}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j>i}^{n} \frac{\pi_i\pi_j - \pi_{ij}}{\pi_{ij}} \left(\frac{\hat{Y}_i}{\pi_i} - \frac{\hat{Y}_j}{\pi_j}\right)^2 + \sum_{i=1}^{n} \frac{v_2(\hat{Y}_i)}{\pi_i}. \tag{5-35}$$

例3　在二阶抽样中，若第一阶抽样中的初级单元是按布鲁尔方法抽取的，第二阶抽样采用简单随机抽样独立地从两个初级单元中抽取 m_1 与 m_2 个次级单元，则总体总量的估计

$$\hat{Y}_B = \frac{\hat{Y}_1}{\pi_1} + \frac{\hat{Y}_2}{\pi_2} = \frac{1}{2}\left(\frac{M_1\bar{y}_1}{z_1} + \frac{M_2\bar{y}_2}{z_2}\right),$$

它的一个无偏方差估计

$$v(\hat{Y}_B) = \frac{\pi_1\pi_2 - \pi_{12}}{\pi_{12}}\left(\frac{M_1\bar{y}_1}{\pi_1} - \frac{M_2\bar{y}_2}{\pi_2}\right)^2 + \sum_{i=1}^{2} \frac{M_i(M_i - m_i)}{m_i\pi_i} s_{2i}^2,$$

其中 $\pi_i = 2z_i$，π_{12} 由式(4-13)确定；$s_{2i}^2 = \frac{1}{m_i - 1}\sum_{j=1}^{m_i}(y_{ij} - \bar{y}_i)^2$.

5.4　三阶及多阶抽样

5.4.1　各级单元大小相等时的三阶抽样

二阶抽样的结果可以推广到三阶及更高阶的抽样中去．以三阶抽样为例，若总体包含 N 个一级单元，每一个一级单元包含 M 个二级单元，而每个二级单元又包含 K 个三级单元，设三阶抽样各阶样本量分别为 n，m 与 k，则与定理 2 类似，有如下定理．

定理 4　在三阶抽样中，若每阶抽样都是简单随机的，且不同的一级单元和二级单元的第二阶抽样与第三阶抽样是相互独立的，则样本(对于三级单元的)均值

$$\bar{\bar{\bar{y}}} = \frac{1}{nmk}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{k} y_{iju} \tag{5-36}$$

是总体均值

$$\bar{\bar{\bar{Y}}} = \frac{1}{NMK}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}\sum_{u=1}^{K} Y_{iju} \tag{5-37}$$

的无偏估计，且方差为

$$V(\bar{\bar{y}}) = \frac{1-f_1}{n}S_1^2 + \frac{1-f_2}{nm}S_2^2 + \frac{1-f_3}{nmk}S_3^2, \tag{5-38}$$

其中 $f_1 = n/N, f_2 = m/M, f_3 = k/K$ 分别是各阶抽样的抽样比；S_1^2, S_2^2, S_3^2 分别是总体一级、二级与三级单元间的方差．即

$$S_1^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(\bar{\bar{Y}}_i - \bar{\bar{Y}})^2,$$

$$S_2^2 = \frac{1}{N(M-1)}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}(\bar{Y}_{ij} - \bar{\bar{Y}}_i)^2,$$

$$S_3^2 = \frac{1}{NM(K-1)}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}\sum_{u=1}^{k}(Y_{iju} - \bar{Y}_{ij})^2,$$

其中

$$\bar{Y}_{ij} = \frac{1}{K}\sum_{u=1}^{K}Y_{iju}, \quad \bar{\bar{Y}}_i = \frac{1}{MK}\sum_{j=1}^{M}\sum_{u=1}^{K}Y_{iju}$$

是二级单元与一级单元均值．

$V(\bar{\bar{y}})$的一个无偏估计为

$$v(\bar{\bar{y}}) = \frac{1-f_1}{n}s_1^2 + \frac{f_1(1-f_2)}{nm}s_2^2 + \frac{f_1f_2(1-f_3)}{nmk}s_3^2, \tag{5-39}$$

其中 s_1^2, s_2^2 与 s_3^2 分别是样本一级、二级与三级单元间的方差．

在多阶抽样中，通常第一阶抽样的方差最为主要，第二阶抽样方差要比第一阶方差小得多，而第三阶及更高阶的方差更小，甚至可以忽略不计．因此为了提高精度，第一、二阶的样本量就不能太小．

5.4.2 各级单元大小不等的多阶抽样

对于各级单元大小不等情形的多阶抽样，通常除最后一阶抽样采用等概率抽样外，其余各阶多采用与单元大小成比例的不等概率抽样，而且为了简化抽样和数据处理，又常采用放回 PPS 抽样．事实上在此情形下，只要各阶样本量(除第一阶的样本外)不随单元而变化，都是固定常数，那么所得的样本是自加权的，从而估计量及其方差估计都有简单的形式．

仍以三阶抽样为例．若前二阶抽样都采用放回 PPS 抽样，样本量分别为 n, m (对于每个在第一阶抽样抽到的初级单元，其第二阶抽样的样本量皆为 m)，第三阶抽样采用样本量为 k 的简单随机抽样，则总体均值 $\bar{\bar{\bar{Y}}}$(按三级单元平均)的估计为

$$\bar{\bar{\bar{y}}} = \frac{1}{nmk}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{k}y_{iju}; \tag{5-40}$$

而它的方差估计

$$v(\bar{\bar{\bar{y}}}) = \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(\bar{\bar{y}}_i - \bar{\bar{\bar{y}}})^2, \tag{5-41}$$

其中

$$\overline{\overline{y}}_i = \frac{1}{mk}\sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{k} y_{iju} \qquad (i = 1,2,\cdots,n).$$

设总体包含 N 个一级单元,第 i 个一级单元包含 M_i 个二级单元,第 i 个一级单元中的第 j 个二级单元又包含 K_{ij} 个三级单元,则总体中所包含的全部三级单元的个数为

$$M_0 = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M_i} K_{ij}, \tag{5-42}$$

此时,总体总量

$$Y = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M_i}\sum_{u=1}^{K_{ij}} Y_{iju} \tag{5-43}$$

的无偏估计为

$$\hat{Y} = M_0\overline{\overline{\overline{y}}} = \frac{M_0}{nmk}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sum_{u=1}^{k} y_{iju}, \tag{5-44}$$

而它的方差估计为

$$v(\hat{Y}) = M_0^2 v(\overline{\overline{\overline{y}}}) = \frac{M_0^{\,2}}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(\overline{\overline{y}}_i - \overline{\overline{\overline{y}}})^2. \tag{5-45}$$

6 系统抽样

6.1 一般描述

6.1.1 定义及实施方法

系统抽样也称机械抽样,是将总体中的单元按某种顺序排列,在规定的范围内随机抽取一个或一组起始单元,然后按一套规则确定其他样本单元的一种抽样方法．系统抽样可以是等概率的,也可以是不等概率的．

定义1 当总体中的 N 个单元按一定顺序排列时,根据样本量 n 确定一个最接近 N/n 的整数 k,在 $1\sim k$ 范围内随机抽取一个整数 r,以单元 r 为起始单元,以后每隔 k 个单元抽取一个单元．这种抽样称为**等距抽样**,其中 k 称为**抽样间距**．

等距抽样是一种等概率系统抽样,此时总体每个单元入样概率皆等于 $1/k$.不过当 $N\neq nk$ 时,按定义1的方法实际抽到的样本单元数不一定恰好等于原先设定的 n.事实上实际样本量可能为 $\left[\frac{N}{k}\right]$,也可能为 $\left[\frac{N}{k}\right]+1$,这里 $\left[\frac{N}{k}\right]$ 表示 N/k 的整数部分．为保证实际样本量一定等于事先设定的 n,可将总体单元按顺序首尾连接,起始单元号码从 $1\sim N$ 范围内产生,然后按每隔 k 个单元(k 仍为最接近 N/n 的整数)抽取一个样本单元,直到抽足 n 个单元为止．这种抽样称为圆形系统抽

样.

6.1.2 系统抽样的特点

系统抽样最突出的优点是简单易行,只要随机确定起始单元后,整个样本就随之而定.它对抽样框的要求也比较简单,在一些现场调查中更是方便.不等概率系统抽样作为一种不放回的抽样,适用于任意样本量,且又是严格的 πPS 抽样,它是同类抽样中最为简单的.

由于简便,系统抽样容易被非专业人员所掌握,而且其抽样过程可以保留,便于监督和检查.对于单元的某些排列形式,系统抽样的精度也很高.

系统抽样的方差估计比较复杂,事实上一般系统抽样不可能找到通常意义下的方差无偏估计量.另外由于许多在实际上行之有效的系统抽样,往往不是严格的概率抽样,因此对它的精度估计就更为困难.

6.2 等概率系统抽样——等距抽样

6.2.1 估计量及其方差的各种表示

最简单的系统抽样,即是等距抽样.为方便讨论起见,设 $N = nk$ 且将总体单元按表 6-1 所示的形式重新排列.

表 6-1

样本号	1	2	…	r	…	k
1	Y_1	Y_2	…	Y_r	…	Y_k
2	Y_{k+1}	Y_{k+2}	…	Y_{k+r}	…	Y_{2k}
…	…	…	…	…	…	…
n	$Y_{(n-1)k+1}$	$Y_{(n-1)k+2}$	…	$Y_{(n-1)k+r}$	…	Y_{nk}
均值	$\bar{y}_1$	$\bar{y}_2$	…	$\bar{y}_r$	…	$\bar{y}_k$

将位于第 r 列第 j 行的单元 $Y_{(j-1)k+r}$ 重新记为 Y_{rj}, $r = 1,2,\cdots,k$; $j = 1,2,\cdots,n$. 可以看出,每一个系统(等距)样本都由一列单元组成.设抽样时起始单元为 r,则很自然地,总体均值 $\bar{Y}$ 的估计可由样本均值来估计,即

$$\bar{y}_{sy} = \bar{y}_r = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} y_{rj} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} Y_{rj}. \tag{6-1}$$

当 $N = nk$ 时, $\bar{y}_{sy}$ 是无偏的.但当 $N \neq nk$ 时,将样本均值作为总体均值的估计就可能造成一定的偏倚.

估计量 $\bar{y}_{sy}$ 的方差,按定义有

$$V(\bar{y}_{sy}) = \frac{1}{k}\sum_{r=1}^{k}(\bar{y}_r - \bar{Y})^2, \tag{6-2}$$

这里仍假定 $N=nk$. $V(\bar{y}_{sy})$可以表示成几种不同形式.

(1)用样本内方差 s_{wsy}^2表示

用样本内方差表示时,有

$$V(\bar{y}_{sy}) = \frac{N-1}{N}S^2 - \frac{k(n-1)}{N}S_{wsy}^2, \tag{6-3}$$

其中

$$S_{wsy}^2 = \frac{1}{k(n-1)}\sum_{r=1}^{k}\sum_{j=1}^{n}(y_{rj}-\bar{y}_r)^2; \tag{6-4}$$

S^2 是总体方差.

(2)用样本(群)内相关系数 ρ_{wsy}表示

按表6-1所示的排列形式,如将列看作群,则系统抽样可以看成是一种特殊的整群抽样,于是

$$V(\bar{y}_{sy}) = \frac{S^2}{n}\left(\frac{N-1}{N}\right)\left(1+(n-1)\rho_{wsy}\right), \tag{6-5}$$

其中 ρ_{wsy}是样本(群)内相关系数,

$$\rho_{wsy} = \frac{2}{(n-1)(N-1)S^2}\sum_{r=1}^{k}\sum_{j<u}^{n}(y_{rj}-\bar{Y})(y_{ru}-\bar{Y}). \tag{6-6}$$

从式(6-3)可以推得,当样本内方差 $S_{wsy}^2 > S^2$ 时,系统抽样的精度优于简单随机抽样;从式(6-5)可知,系统样本内相关 ρ_{wsy}愈小,也即样本内指标差异愈大,估计就愈精确.

6.2.2　方差与总体单元排列顺序的关系

系统抽样的精度不仅取决于总体方差,而且也取决于总体单元的排列顺序.

(1)随机排列总体　如果总体单元的排列与指标值不相关,排列顺序就可以看作是随机的,此时系统抽样的精度从总体而言与简单随机抽样的相同.

(2)线性趋势总体　如果总体单元的排列与指标值呈线性关系,则由于此时样本内方差较大,从而系统抽样的精度可大为提高.在实际情况中,当单元是按某个与指标值线性相关的另一辅助指标的大小顺序排列时,即是此种情形.

(3)周期性波动总体　如果总体单元指标值按一定间隔呈周期变化,则系统抽样的精度与抽样间距 k 及指标变化周期 T 有很大关系.在此种情形下,必须精心选择 k 与 n 才能获得理想的效果.

6.2.3　线性趋势总体抽样方法的改进

线性趋势总体单元指标值可用以下模型描述:

$$Y_i = a + b_i + \varepsilon_i \qquad (i=1,2,\cdots,N), \tag{6-7}$$

其中 ε_i 是随机波动.对于此类总体,如何决定样本的起始单元的位置对估计量的影响很大,为进一步提高精度,有以下几种改进方法.

1. 中心位置样本

如将起始单元 r 取为 $(k+1)/2$（当 k 为奇数时），$k/2$ 或 $\frac{k}{2}+1$（当 k 为偶数时），则可最大程度地减少方差．不过采用这种方法时，在总体单元的顺序及 k 确定后，样本也就确定了，这与概率抽样的要求不相符．

2. 首尾校正法

在用样本均值估计总体均值时，对系统样本中首尾两个样本观测值赋予不同于 $1/n$ 的权：

$$w_1 = \frac{1}{n} + \frac{2r-k-1}{2(n-1)k}, \quad w_n = \frac{1}{n} - \frac{2r-k-1}{2(n-1)k}, \tag{6-8}$$

其余 $n-2$ 个样本观测值的权 w_i 仍为 $1/n$，于是，$\bar{Y}$的估计量修正为：

$$\bar{y}_r = \sum_{j=1}^{n} w_j y_{rj}. \tag{6-9}$$

若模型式(6-7)是严格线性($\varepsilon_i=0, i=1,2,\cdots,N$)的，则 $\bar{y}_r=\bar{Y}$.

3. 对称系统抽样法

对称系统抽样也称为平衡系统抽样，与一般等距抽样的主要区别是，它的起始单元不是一个，而是两个，因而样本单元实际是成对抽取的．对称系统抽样又有两种具体方法．

(1)层内对称系统抽样，也称塞蒂(Sethi)方法．设 $N=nk$，且 n 为偶数，在 $1\sim k$ 范围内的随机数 r 产生后，$n/2$ 对样本单元的号码为

$$\{r+2jk, 2(j+1)k-r+1\} \qquad \left(j=0,1,\cdots,\frac{n}{2}-1\right). \tag{6-10}$$

(2)总体对称系统抽样，也称辛(Singh)方法．设 $N=nk$，且 n 为偶数，在随机数 r 产生后，$n/2$ 对样本单元的号码为

$$\{r+jk, (N-jk)-r+1\} \qquad \left(j=0,1,\cdots,\frac{n}{2}-1\right). \tag{6-11}$$

6.2.4 方差估计

系统抽样的方差估计比较困难，实际上对于系统抽样，没有与其他抽样方法那样通常意义下的方差无偏估计．

下面从不同角度出发，给出几种等概率系统抽样方差估计量．其中样本观测值 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 的顺序与单元在总体中的顺序相同．

(1)若将系统样本作为简单随机样本处理，则相应的方差估计可采用

$$v_1 = \frac{1-f}{n}s^2 = \frac{1-f}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y}_{sy})^2, \tag{6-12}$$

其中 $1-f=\frac{N-n}{N}$是有限总体修正系数．v_1 特别适用于随机排列总体；对于线性趋势总体，v_1 往往高估了方差．

(2)设 n 为偶数，若将样本观测值按顺序两两分成一组，则第 i 组的两个观测

值的方差估计可取为$(y_{2i}-y_{2i-1})^2/2$,将 $n/2$ 个这样的数值平均,再乘上$(1-f)/n$,即得

$$v_2=\frac{1-f}{n^2}\sum_{i=1}^{n/2}(y_{2i}-y_{2i-1})^2. \tag{6-13}$$

考虑从第二个样本观测值起,每个与前一个组成一组,共 $n-1$ 组,与上面同样的思路可得另一个估计

$$v_3=\frac{1-f}{2n(n-1)}\sum_{i=1}^{n-1}(y_{i+1}-y_i)^2. \tag{6-14}$$

v_2,v_3 的适用范围很广,可以用于几乎所有类型的总体,对于线性趋势总体尤为适宜.当样本量比较小时,v_3 比 v_2 更精确.

6.3 不等概率系统抽样

6.3.1 πPS 系统抽样及实施方法

一般的**不等概率系统抽**样可以通过如下途径得到:令$\{\pi_i\}$是一组入样概率,$i=1,2,\cdots,N$,且$\sum_{i=1}^{N}\pi_i=n$,r 是$[0,1]$区间内的一随机数,则当

$$\sum_{j=1}^{i_k-1}\pi_j<r+k,\quad \sum_{j=1}^{i_k}\pi_j\geqslant r+k\qquad(k=0,1,\cdots,n-1) \tag{6-15}$$

时,总体中的第 $i_1,i_2,\cdots,i_m$ 个单元即为抽中的样本单元.当 π_i 都小于1时,抽样是严格不放回的.

若 M_i 是第 i 单元的大小,$i=1,2,\cdots,N$,$M_0=\sum_{i=1}^{N}M_i$,则

$$\pi_i=n\frac{M_i}{M_0}. \tag{6-16}$$

上述抽样称为**πPS 系统抽样**.

在实际应用中,若用代码法,则 πPS 系统抽样与等概率系统抽样非常类似:先将 M_i 值累加,设 r 为$(0,M_0/n]$中的随机数,则以 $k=M_0/n$ 为间距等距地抽取代码,代码所对应的单元即为抽中的样本单元(若 k 恰为整数,则可在 $1\sim k$ 范围内抽取随机整数 r).

6.3.2 估计量及其方差估计

与通常 πPS 抽样一样,πPS 系统抽样对总体总量 Y 的估计采用霍维兹-汤普森估计:

$$\hat{Y}_{HT}=\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i}{\pi_i}=\frac{M_0}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i}{M_i}. \tag{6-17}$$

$\widehat{Y}_{HT}$是无偏的,其方差

$$V(\widehat{Y}_{HT}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1-\pi_i}{\pi_i} Y_i^2 + 2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} \frac{\pi_{ij}-\pi_i\pi_j}{\pi_i\pi_j} Y_i Y_j$$
$$= \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} (\pi_i\pi_j - \pi_{ij})\left(\frac{Y_i}{\pi_i} - \frac{Y_j}{\pi_j}\right)^2.$$

但对于一般的 n,π_{ij}的形式极为复杂,且有很多为零,故 $V(\widehat{Y}_{HT})$的估计不能用类似于式(4-11)与式(4-12)的形式,以下是几种可采用的方差估计.

(1)将不放回的 πPS 系统样本作为放回的 PPS 样本处理,可考虑以下方差估计形式:

$$\frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{y_i}{z_i} - \widehat{Y}_{HT}\right)^2 = \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{ny_i}{\pi_i} - \widehat{Y}_{HT}\right)^2.$$

因为实际抽样是不放回的,故应考虑乘上有限总体修正系数 $1-f$. 由于单元的抽取是不等概率的,因此应使用 f 的如下估计:

$$\hat{f} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\pi_i. \tag{6-18}$$

于是 $\widehat{Y}_{HT}$的一个方差估计为

$$v_4 = \frac{1-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\pi_i}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{ny_i}{\pi_i} - \widehat{Y}_{HT}\right)^2. \tag{6-19}$$

(2)与等概率系统抽样情形类似,若考虑用相邻样本观测值(用 ny_i/π_i 代替等概率情形的 y_i)的差值平方和来表示方差,则得到如下两种方差估计:

$$v_5 = \frac{1-\hat{f}}{n^2}\sum_{i=1}^{n/2}\left(\frac{ny_{2i}}{\pi_{2i}} - \frac{ny_{2i-1}}{\pi_{2i-1}}\right)^2,$$

$$v_6 = \frac{1-\hat{f}}{2n(n-1)}\sum_{i=2}^{n}\left(\frac{ny_i}{\pi_i} - \frac{ny_{i-1}}{\pi_{i-1}}\right)^2.$$

对于随机排列总体,v_5 的效果不错;而对于具有线性趋势的总体,v_5 与 v_6 更为适用.

参 考 文 献

1 冯士雍,施锡铨著. 抽样调查——理论、方法与实践. 上海:上海科学技术出版社,1996.

2 Cochran W G. Sampling techniques. 3rd ed. New York:John Wiley & Sons,1977.

3 Kish L. Survey sampling. New York:John Wiley & Sons,1965.

4 Särndal C-E, Swensson B, Wretman J. Model assisted survey sampling. New York: Springer-Verlag,1992.

随机数表

28 89 65 87 08	13 50 63 04 23	25 47 57 91 13	52 62 24 19 94	91 67 48 57 10
30 29 43 65 42	78 66 28 55 80	47 46 41 90 08	55 98 78 10 70	49 92 05 12 07
95 74 62 60 53	51 57 32 22 27	12 72 72 27 77	44 67 32 23 13	67 95 07 76 30
01 85 54 96 72	66 86 65 64 60	56 59 75 36 75	46 44 33 63 71	54 50 06 44 75
10 91 46 96 86	19 83 52 47 53	65 00 51 93 51	30 80 05 19 29	56 23 27 19 03
05 33 18 08 51	51 78 57 26 17	34 87 96 23 95	89 99 93 39 79	11 28 94 15 52
04 43 13 37 00	79 68 96 26 60	70 39 83 66 56	62 03 55 86 57	77 55 33 62 02
05 85 40 25 24	73 52 93 70 50	48 21 47 74 63	17 27 27 51 26	35 96 29 00 45
84 90 90 65 77	63 99 25 69 02	09 04 03 35 78	19 79 95 07 21	02 84 48 51 97
28 55 53 09 48	86 28 30 02 35	71 30 32 06 47	93 74 21 86 33	49 90 21 69 74
89 83 40 69 80	97 96 47 59 97	56 33 24 87 36	17 18 16 90 46	75 27 28 52 13
73 20 96 05 68	93 41 69 96 07	97 50 81 79 59	42 37 13 81 83	92 42 85 04 31
10 89 07 76 21	40 24 74 36 42	40 33 04 46 24	35 63 02 31 61	34 59 43 36 96
91 50 27 78 37	06 06 16 25 98	17 78 80 36 85	26 41 77 63 37	71 63 94 94 33
03 45 44 66 88	97 81 26 03 89	39 46 67 21 17	98 10 39 33 15	61 63 00 25 92
89 41 58 91 63	65 99 59 97 84	90 14 79 61 55	56 16 88 87 60	32 15 99 67 43
13 43 00 97 26	16 91 21 32 41	60 22 66 72 17	31 85 33 69 07	68 49 20 43 29
71 71 00 51 72	62 03 89 26 32	35 27 99 18 25	78 12 03 09 70	50 93 19 35 56
19 28 15 00 41	92 27 73 40 38	37 11 05 75 16	98 81 99 37 29	92 20 32 39 67
56 38 30 92 30	45 51 94 69 04	00 84 14 36 37	95 66 39 01 09	21 68 40 95 79
39 27 52 89 11	00 81 06 28 48	12 08 05 75 26	03 35 63 05 77	13 81 20 67 58
73 13 28 58 01	05 06 42 24 07	60 60 29 99 93	72 93 78 04 36	25 76 01 54 03
81 60 84 51 57	12 68 46 55 89	60 09 71 87 89	70 81 10 95 91	83 79 68 20 66
05 62 98 07 85	07 79 26 69 61	67 85 72 37 41	85 79 76 48 23	61 58 87 08 05
62 97 16 29 18	52 16 16 23 56	62 95 80 97 63	32 25 34 03 36	48 84 60 37 65
31 13 63 21 08	16 01 92 58 21	48 79 74 73 72	08 64 80 91 38	07 28 66 61 59
97 38 35 34 19	89 84 05 34 47	88 09 31 54 88	97 96 86 01 69	46 13 95 65 96
32 11 78 33 82	51 99 98 44 39	12 75 10 60 36	80 66 39 94 97	42 36 31 16 59
81 99 13 37 05	08 12 60 39 23	61 73 84 89 18	26 02 04 37 95	96 18 69 06 30
45 74 00 03 05	69 99 47 26 52	48 06 30 00 18	03 30 28 55 59	66 10 71 44 05
11 84 13 69 01	88 91 28 79 50	71 42 14 96 55	98 59 96 01 63	88 77 90 45 59
14 66 12 87 22	59 45 27 08 51	85 64 23 85 41	64 72 08 59 44	67 98 36 65 56
40 25 67 87 82	84 27 17 30 37	48 69 49 02 58	98 02 50 58 11	95 39 06 35 63
44 48 97 49 43	65 45 53 41 07	14 83 46 74 11	76 66 63 60 08	90 54 33 65 84
41 94 54 06 57	48 28 01 83 84	09 11 21 91 73	97 28 44 74 06	22 30 95 69 72
07 12 15 58 84	93 18 31 83 45	54 52 62 29 91	53 58 54 66 05	47 19 63 92 75
64 27 90 43 52	18 26 32 96 83	50 58 45 27 57	14 96 39 64 85	73 87 96 76 23
80 71 86 41 03	45 62 63 40 88	35 69 34 10 94	32 22 52 04 74	69 63 21 83 41
27 06 08 09 92	26 22 59 28 27	38 58 22 14 79	24 32 12 38 42	33 56 90 92 57
54 68 97 20 54	33 26 74 03 30	74 22 19 13 48	30 28 01 92 49	58 61 52 27 03
02 92 65 68 99	05 53 15 26 70	04 69 22 64 07	04 73 25 74 82	78 35 22 21 88
83 52 57 78 62	98 61 70 48 22	68 50 64 55 75	42 70 32 09 60	58 70 61 43 97
82 82 76 31 33	85 13 41 38 10	16 47 61 43 77	83 27 19 70 41	34 78 77 60 25
38 61 34 09 49	04 41 66 09 76	20 50 73 40 95	24 77 95 73 20	47 42 80 61 03
01 01 11 88 38	03 10 16 82 24	39 58 20 12 39	82 77 02 18 88	33 11 49 15 16
21 66 14 38 28	54 08 18 07 04	92 17 63 36 75	33 14 11 11 78	97 30 53 62 38
32 29 30 69 59	68 50 33 31 47	15 64 88 75 27	04 51 41 61 96	86 62 93 66 71
04 59 21 65 47	39 90 89 86 77	46 86 86 88 86	50 09 13 24 91	54 80 67 78 66
38 64 50 07 36	56 50 45 94 25	48 28 48 30 51	60 73 73 03 87	68 47 37 10 84
48 33 50 83 53	59 77 64 59 90	58 92 62 50 18	93 09 45 89 06	13 26 98 86 29

·随机数学卷·

第5篇

质量管理

编　者　崔恒建
审校者　项可风

目　录

引　言

质量管理是指用经济的方法生产出符合规格和用户要求或期望的产品的各种活动．由于现代的质量管理绝大多数是采用数理统计方法、即在生产活动开始后，根据**统计推断**的理论，在活动的全过程中适时地用度量、比较、纠正和复证的办法，来监督进行的，因此质量管理有时也称为统计质量控制，其主要研究内容包括预防性抽样方法（如质量控制图）、成批产品抽样检查和可靠性测定等．

质量管理作为一门科学，从1924年美国贝尔电话实验室的统计学家休哈特（W. A. Shewhart）创立控制图起，至今已有70多年历史，经历了质量管理的初级（QC）阶段、统计质量管理（SQC）阶段和全面质量管理（TQC）阶段等三个阶段．目前质量管理已有了一套比较成熟的科学方法，它是数理统计与概率论在工业企业质量管理方面的具体应用，是工业企业管理和应用数学的边缘学科．对现代化企业来说，科学管理的内容很多，但各种科学管理的目的都集中地反映在产品的质量上，所以质量管理既是科学管理的目的，又是科学管理的核心．本篇将主要介绍生产过程中的质量管理、质量控制方法、控制图以及抽样检查方法．这些方法简单易行，收效显著，便于推广，它的运用范围已涉及到工业企业的各行各业，对提高工业产品的质量起到了关键性作用．

1　引　论

1.1　质量管理的基本组成部分

1.1.1　设计过程的质量管理

设计过程是指产品正式投产前的全部技术准备过程．它主要包括产品设计、试制和鉴定等．产品设计是根据社会需要和消费者的使用要求，使产品具有造型美、成本低、使用价值高等特点的技术准备工作，它是决定产品质量的基础．新产品的试制和鉴定是验证设计目的和要求是否达到的一种方法，同时也是对设计的最好检验．

1.1.2　制造生产过程的质量管理

制造生产过程的质量管理是指产品正式投产后全部生产过程的质量管理，即质量控制过程．它是质量管理的核心．其目的是要建立稳定的生产体系，对各工序的质量控制与检验以及不合格产品进行管理等．通过产品检验，可以监督和控制产品质量，并对产品质量的发展趋向加以预测，在产品质量异常苗头刚一出现

时,就立即分析原因,提出解决质量问题的措施.

1.1.3　使用过程的质量管理

产品的使用过程就是检验产品质量的过程.它既是质量管理的归宿点,又是质量管理的出发点.使用过程的质量管理包括既要做好对用户的技术服务工作(包括详细编制使用说明书等),又要设立技术维修站,供应用户修理所需的零备件,同时还要进行使用效果的跟踪调查,把所得信息及时地反馈到设计部门.

1.2　产品质量的检验方法

产品质量的检验方法可分为全面检验和抽样检验.

1.2.1　全面检验

全面检验即是对每批中所有产品逐一检验。所谓批是指在一定条件下生产出来的一定数量的单位产品(实施抽样检查而对产品划分的基本单位).这种方法适用于机械化程度不高的手工业产品、精密仪器等.全面检验的必要条件是对产品无破坏性.一般不允许进行破坏性的全面检验,如电子原件的可靠性检验,军工产品中对弹头的性能、效力的检验等.全面检验的优点是简单易行,一般不需要有专门技术的检验员,对产品质量的保证基本上不存在风险;缺点是工作量太大.

1.2.2　抽样检验

抽样检验简单地说就是从产品总体中抽取部分样本,通过样本的质量信息,推断总体的质量水平的方法.抽样检验具有节省时间、人力和经济合算的优点.但是抽样检验存在风险,即有可能接收质量低劣的产品批,也有可能拒收质量优良的产品批.

1.3　工序能力指数

工序能力是指工序处于稳定状态下实际加工的能力(通常用产品质量特征的波动范围 6σ 来表示),它反映产品制造在生产质量方面的能力.

1.3.1　工序能力指数

当产品特征值 X 分布的平均值 $\mu = T_c = (T_U + T_L)/2$ 时,**工序能力指数** C_p 定义为

$$C_p = \frac{T}{6\sigma} \qquad (\text{双侧规格}),$$

其中 $T = T_U - T_L$ 为产品设计中的**公差**,T_U,T_L 分别为产品规格的上、下限;T_c 为公差中心;σ 为产品总体的标准差.当样本比较多时,可用样本**均值** $\bar{x}$、样本**标准差** s 分别作为 μ、σ 的估计值.

在工序能力指数的定义中，T 反映产品质量的要求，σ 则反应产品质量的散布程度．二者的比值反映了生产过程满足产品设计要求的能力．

1.3.2　工序能力指数的规定标准

(1) 当 $C_p > 1.67$ 时，认为工序能力充裕，可以设法降低产品成本或缩小公差范围．

(2) 当 $1.33 < C_p \leqslant 1.67$ 时，认为工序能力强，能充分满足产品设计要求．

(3) 当 $1.0 < C_p \leqslant 1.33$ 时，认为工序能力一般，可以达到产品设计要求．

(4) 当 $0.67 < C_p \leqslant 1.0$ 时，认为工序能力弱，难以达到产品设计的要求，会出不合格品，须采取措施进行检查．

(5) 当 $C_p \leqslant 0.67$ 时，认为工序能力严重不足，应采取紧急措施改进工序或放松公差范围．

上述标准是不难理解的，实际上，当 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ 时，质量特征值落在 $(\mu - \sigma, \mu + \sigma)$ 内的概率为 68.27%；落在 $(\mu - 2\sigma, \mu + 2\sigma)$ 内的概率为 95.45%；落在 $(\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma)$ 内的概率为 99.73%．

当工序能力指数为 C_p 时，产品不合格率为

$$p^* = 2(1 - \Phi(3C_p)),$$

其中 $\Phi(x)$ 为标准正态分布 $N(0,1)$ 的分布函数．当 $C_p = 1.67$ 时，$p^* = 0.000\,1\%$；当 $C_p = 1.33$ 时，$p^* = 0.01\%$；当 $C_p = 1$ 时，$p^* = 0.27\%$；当 $C_p = 0.67$ 时，$p^* = 4.55\%$．

1.3.3　修正工序能力指数

当产品特征值总体分布的平均值 μ 偏离 $(T_U + T_L)/2$ 时，常用修正工序能力指数 C_{pk}，C_p^* 来代替工序能力指数．它们分别定义为

$$C_{pk} = \frac{T}{6\sigma}(1 - k) = \frac{T_U - T_L}{6\sigma}\left(1 - \frac{\left|\mu - \left(\frac{T_U + T_L}{2}\right)\right|}{\left(\frac{T_U - T_L}{2}\right)}\right),$$

$$C_p^* = \frac{T}{6\sqrt{E(X - T_c)^2}} = \frac{T_U - T_L}{6\sqrt{\sigma^2 + \left(\mu - \left(\frac{T_U + T_L}{2}\right)\right)^2}}.$$

2　产品质量与质量控制

2.1　质量与质量表示

产品质量是指产品或服务能够符合规定要求或能满足用户和社会要求的程度．在工业生产中，产品质量具体是指产品为满足使用要求而应具备的形式和状态

的数量指标(也称质量指标). 一个具体的产品常需用多个指标来表示它的质量. 测量或测定质量指标所得的数值称为质量特征值或质量数据.

根据质量指标特性的不同,质量特征值可分为计数值和计量值两类. 当质量特征值只取一组特定的离散数值而不能取这些数值之间的数时,这样的特征值就叫做**计数值**. 计数值又可分为计件值和计点值. 对产品进行按件检查时所产生的属性(评定"好"或"坏")数据称为计件值,如一批产品中的合格品数、废品数等. 每件产品上质量缺陷的个数称为计点值,如棉布上的疵点数、铸件上的砂眼等.

当质量特征值可以取给定范围内的任何一个可能的数值时,这样的特征值就叫做**计量值**. 如用各种计量工具测量的数据(长度、重量、时间等)就是计量值.

一般地,不同类的质量特征值所形成的统计规律是不一样的,因而形成了不同的质量控制方法.

2.2 质量特征值的统计规律

在同一生产条件下,同一产品的各个体的某一质量指标的质量特征值是有差异的,这种差异称之为产品质量的**散布**. 一般地,产品的散布有如下特点:

(1)产品质量必有散布,由此而设有公差;

(2)散布的大小是可以量度的,通常散布值越小越好;

(3)大量同类产品的散布呈现出统计规律,而且大多数产品的计量值在通常情况下服从**正态分布**规律.

造成产品的散布或变异的原因可分为如下两大类.

第一类是随机因素,其特点是,(1)对产品的质量影响微小;(2)始终存在;(3)对产品质量的影响逐件不同;(4)不能够采取措施予以经济地消灭. 如原材料质量的微小变化、机床的微小振动、温度的变化等. 由于它们的作用微小,在技术上也不易识别和消除,如果要把它们都一一找出来加以控制,不仅经济上不合算,而且事实上也不可能.

第二类是系统因素,其特点是,(1)对产品的质量影响较大;(2)间或存在;(3)对一系列的产品质量都发生影响;(4)较易被觉察出来,并能及时地、经济地予以消除和纠正. 如原材料的较大变化、工艺过程的变动、车刀磨损、操作人员的失误等.

产品质量特征值的变化,如果单纯是由随机因素引起的,那么一般认为这个生产过程是稳定的,即产品质量是稳定的,在数理统计学上称为生产过程处于**统计控制状态**;否则称为生产过程处于非统计控制状态. 因此,如何及时地发现产品的生产过程是否处于统计控制状态,是质量控制的中心问题.

2.3 质量控制的基本方法

统计质量控制的基本方法有两种:

(1)用控制界线来判断随机性因素和系统性因素,以使消除异常波动,保持生产过程稳定,使生产过程始终处于统计控制状态;

(2)根据一小部分产品质量的检查结果来推断整批产品的质量,以便了解整批产品的质量情况及其趋向,进一步控制并提高产品质量,消灭或尽量减少不合格产品的产生.

3 质量控制图

3.1 质量控制图的基本格式

生产过程控制的目的是保证制造过程处于统计控制状态,预防废品的出现,这种统计控制方法的典型工具就是质量控制图.根据概率统计原理,在普通的坐标纸上作出两条控制界限线和一条中心线,然后把抽样所得的质量特征值(或样本统计量)按抽样的时间先后以点子的形式描在图上,以点子的动态分布情况来探讨工序的质量和其质量趋势,这种图就是**质量控制图**,如图 3-1 所示.横坐标为按时间

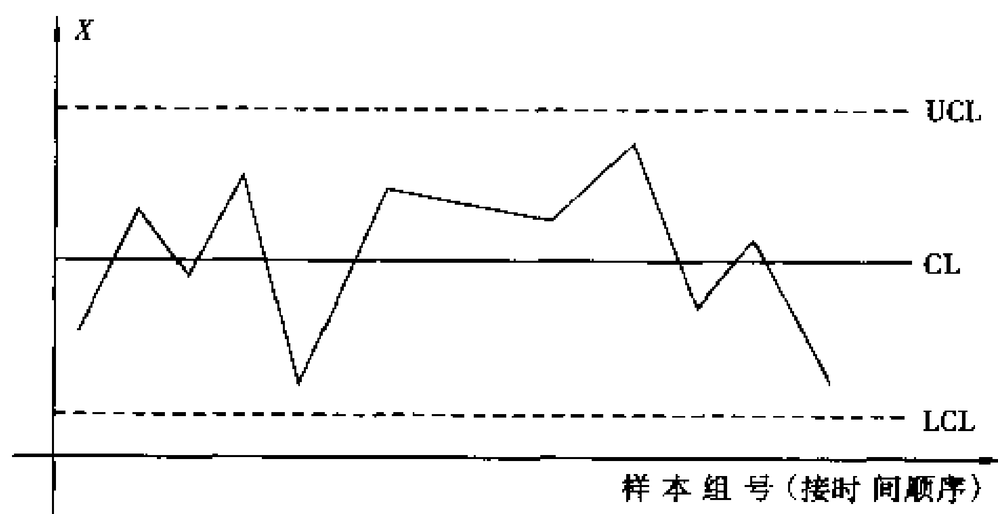


图 3-1

先后排列的样本组号;纵坐标为质量特征值或其样本统计量;两条控制界限线一般用虚线表示,上方的一条称为上控制界限(记为 UCL);下方的一条称为下控制界限(记为 LCL);中心线用实线表示(记为 CL).

3.2 质量控制图的基本原理

在生产过程中,定时抽取样本,把测得的点子按时间先后一一描在质量控制图上.如果点子落在两控制界限线之间,且点子排列是随机的,则表明生产过程仅仅有随机因素存在,生产过程基本是正常的,处于统计控制状态,此时对生产过程不必干预;如果点子落在两控制界限线之外,或点子在两控制界限线内的排列是非随机的,则表明生产过程中有系统性原因存在,工序已处于非统计控制状态,此时必

须对工序采取措施．用控制图对生产过程不断地进行监控，就能够对系统性因素的出现及时告警，并对工序进行控制．

如在生产过程中，仅有随机或偶然因素存在，则产品质量特征值 X 将形成某种典型分布，通常为正态分布；当出现系统因素时，X 就会偏离原来的典型分布．可用统计学中的**假设检验**方法来及时发现这种分布的偏离，从而以此来判断系统性因素是否存在．

设当工序不存在系统性因素时，$X \sim N(\mu,\sigma^2)$，于是有

$$P\{\mu-3\sigma \leqslant X \leqslant \mu+3\sigma\}=0.9973,$$

如图 3-2 所示．X 落在两条虚线外的概率之和只有 0.27%，这是一个很小的概率．出现这样概率的事件叫作**小概率事件**．概率统计理论认为，小概率事件在一次实验中是不会发生的．

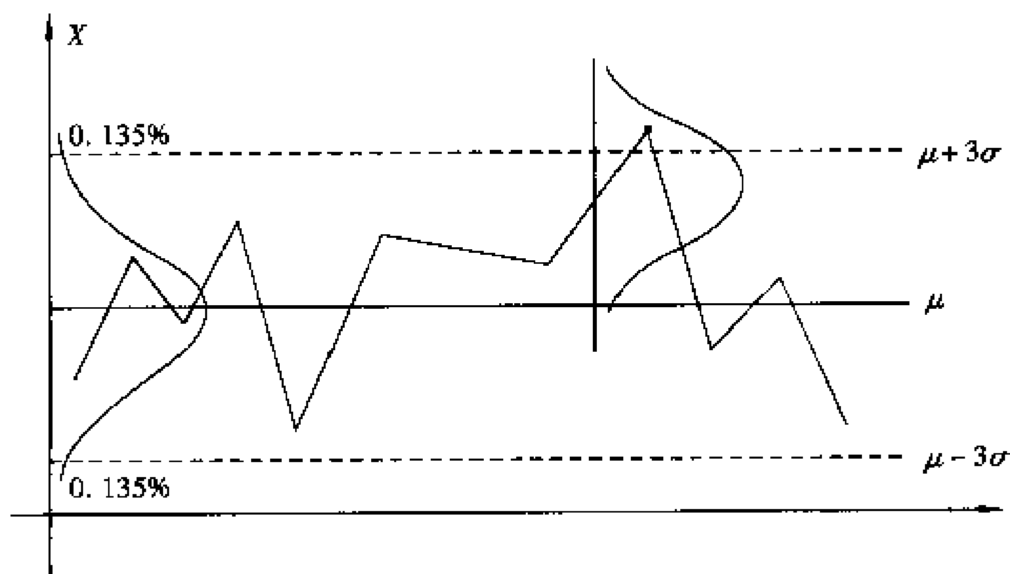


图 3-2

按加工次序每隔一定时间抽取一个样品，如果这工序仍然只受到随机性因素的影响，那么被抽取的产品的特征值仍服从原来的正态分布，该产品的特征值落到两条虚线外几乎是不可能的．如果某一产品的特征值落到了两条虚线外，由上可知，这种可能性只有 0.27%，一般认为这在一次试验中是不会发生的，如果发生了，就说明原来的分布出现了较大的变化．像图 3-2 所示的第 2 个正态分布曲线那样，超过两条虚线外的面积不再是 0.27%，而可能是百分之几了．可以认为，点子落到两条虚线之外，就表明生产过程出现了系统原因．

习惯上，把 $\mu-3\sigma$ 定为 LCL，$\mu+3\sigma$ 定为 UCL，μ 定为 CL，这样得到的控制图称为 **3σ 原理控制图**，也称为**休哈特控制图**．更一般地，设 Y 是要控制的质量特征值的某个样本统计量，则

$$\begin{cases}\mathrm{CL}=E(Y),\\ \mathrm{UCL}=E(Y)+3\sigma(Y),\\ \mathrm{LCL}=E(Y)-3\sigma(Y),\end{cases}$$

其中 $E(Y)$ 是 Y 的数学期望值；$\sigma(Y)$ 是 Y 的标准差．

3.3 控制图的诊断

采用质量控制图的目的是分析生产过程是否处于统计控制状态，同时分析产品质量是否符合规定标准．

如果控制图上的点子同时满足下述两个条件，则认为生产过程处于统计控制状态．

(1)绝大多数点子位于控制界限线内．即

①连续 25 个点中没有一点在界外；

②连续 35 个点中至多有一点在界外；

③连续 100 个点中至多有两点在界外．

(2)点子排列无下述异常现象：

①同侧链　连续 7 点或更多点位于中心线同侧；

②单调链　连续 7 点或更多点呈单调上升或下降趋势；

③间断同侧链　对于某一 $i(i=1,2,3,4)$，在连续 $8+3i$ 点中至少有 $8+2i$ 点在中心线同一侧；

④高位链或低位链　连续 3 点中至少有 2 点或连续 7 点中至少有 3 点落在 2 倍的标准差之外．

根据休哈特控制图来对工序稳定性作出判断时，可能犯两种错误：第一种是根据(1)对工序下异常的结论时，可能犯虚发警报的错误，即把处于统计控制状态的工序过程判为异常的工序过程的错误．这种错误常称为**第一类错误**，犯此类错误的概率记为 α．在 3σ 原理控制图中，$\alpha=0.27\%$．α 的值是在(1)的基础取定的．取如此小的 α 值的原因是：如果 α 的取值较大，则点子出界虚发警报的错误次数将增加，始终找不出系统性原因的次数也将频繁出现，这会使人们丧失对控制图的信心．此外，由误发警报而造成的停机损失也将增大．所以 α 比通常的假设检验的显著水平小得多．第二种是对工序下正常结论时，可能犯漏发警报的错误．有时虽然工序实际上已经有了异常，分布也已偏离了原来的典型分布，但在控制图上点子仍有相当大的可能(如图 3-2 所示的第 2 个分布曲线)落在两条控制界限内．这时如果根据点子的分布下正常结论，就会犯漏发警报的错误．这种错误常称为**第二类错误**．犯此类错误的概率记为 α^*．为了减少第二类错误，引进了(2)中的①～④的判断规则．这些判断规则的统计意义如下．

在工序处在统计控制状态下时，出现①～④的事件是小概率事件，此处的小概率通常取为 2%，特记为 $\alpha^*=2\%$，它比 α 大．

由于正态分布的对称性，点子在 CL 线指定的一侧出现的概率为 1/2，故出现(2)中的①事件的概率

$$P=2\times(0.997\,3/2)^7=0.015\,3=1.53\%<\alpha^*;$$

出现③中的 $i=2$ 事件的概率

$$P=2\times\left(\binom{14}{12}(0.997\,3/2)^2+\binom{14}{13}(0.997\,3/2)^{13}\times\right.$$

$$(0.997\,3/2)+(0.997\,3/2)^{14}\Big)\approx 1.25\%<\alpha^*,$$

其中

$$\binom{n}{m}=\frac{n!}{m!\ (n-m)!}\qquad (n\geq m),$$

根据正态分布的性质，点子在控制图中心线一侧超过 2σ 界限而仍在 3σ 界限之内的概率

$$P=2\times(0.022\,8-0.001\,35)=0.042\,9,$$

因此出现④中连续3点中至少有2点落在 2σ 与 3σ 控制界限之内的概率(图3-3)

$$P=\binom{3}{2}(0.042\,9)^2(1-0.042\,9)+(0.042\,9)^3=0.53\%<\alpha^*.$$

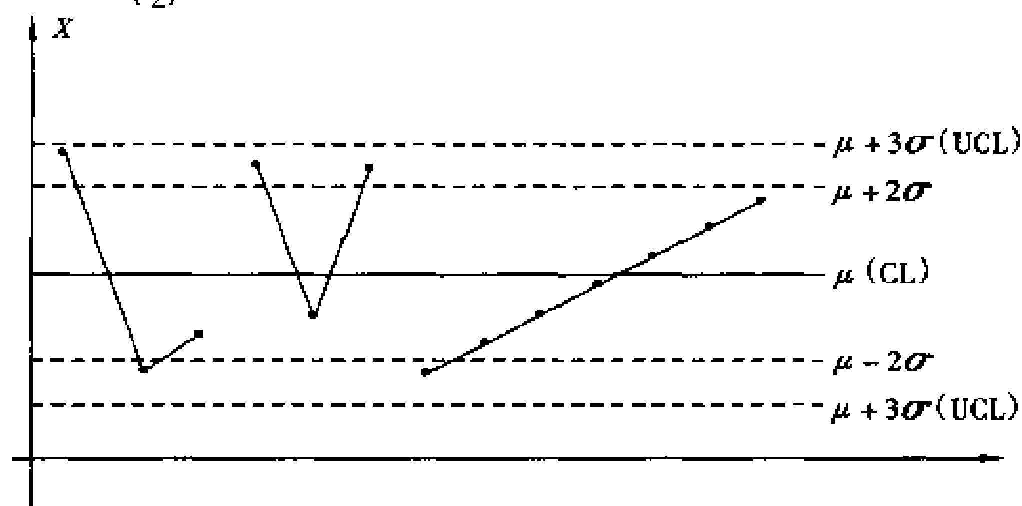


图 3-3

3.4 几种常用的休哈特控制图

制定控制图的准备工作，对各种控制图来说，基本是相同的.

1. 选择需要控制的质量特征

要选择能定量的、对下道工序影响较大又经常出现的质量特征，或选择与使用和生产关系重大的质量特征.

2. 分析生产过程

全面分析生产过程，以确定可能发生异常的地方和原因，确定控制点.

3. 收集数据

从稳定的生产工序抽取数据. 抽取数据前要事先确定抽样间隔和样本量，确定分组原则和组数. 组数一般不小于25，总的数据个数一般不小于100个.

4. 选择控制图

质量特征以计量值表示时使用计量控制图. 常用的计量控制图有：均值($\bar{x}$)控制图、中位数($\tilde{x}$)控制图、单值(x)控制图、标准差(s)控制图、极差(R)控制图及移动极差(R_s)控制图.

质量特征以计数值表示时使用计数控制图．常用的计数控制图有：不合格品率(p)控制图、不合格品数(pn)控制图、单位缺陷数(u)控制图和缺陷数(c)控制图。

计量值转化为计数值后也可使用计数控制图．几个控制图还可以组合起来使用．

制定控制图就是要确定控制图的三条线，即 UCL，CL 及 LCL。

下面分别介绍几种常规控制图三条线的计算公式，并记 x_{ij}为第 i 个样本的第 j 个观测值；$\overline{x_i}$，s_i，R_i 分别为第 i 个样本的样本均值、样本标准差和样本极差；n_i 为第 i 个样本的样本量；k 为样本个数．于是，有

$$\begin{cases}\overline{x_i} = \dfrac{1}{n_i}\sum\limits_{j=1}^{n_i} x_{ij}, \\ s_i = \sqrt{\dfrac{1}{n_i - 1}\sum\limits_{j=1}^{n_i}(x_{ij} - \overline{x_i})^2}, \\ R_i = \max\limits_{1 \le j \le n_i}\{x_{ij}\} - \min\limits_{1 \le j \le n_i}\{x_{ij}\},\end{cases}$$

其中 $i = 1,2,\cdots,k$.

3.4.1　均值 - 极差控制图($\overline{x}$-R 图)

当各样本的样本量相等，即 $n_1 = n_2 = \cdots = n_k = n$ 时，对于 $\bar{x}$ 控制图，有

$$\begin{cases}\text{CL} = \bar{\bar{x}}, \\ \text{UCL} = \bar{\bar{x}} + A_2\bar{R}, \\ \text{LCL} = \bar{\bar{x}} - A_2\bar{R}.\end{cases}$$

其中 $\bar{\bar{x}} = (\frac{1}{k})\sum\limits_{i=1}^{k} \bar{x}_i$；$\bar{R} = (\frac{1}{k})\sum\limits_{i=1}^{k} R_i$；$A_2$ 为常数，可按表 3-1 所示选取．

表 3-1

样本量	A_2	d_2	$1/d_2$	d_3	D_3	D_4
2	1.880	1.128	0.886	0.853	—	3.267
3	1.023	1.693	0.591	0.888	—	2.575
4	0.729	2.059	0.486	0.880	—	2.282
5	0.579	2.326	0.430	0.864	—	2.115
6	0.483	2.534	0.395	0.848	—	2.004
7	0.419	2.704	0.370	0.833	0.076	1.924
8	0.373	2.847	0.351	0.820	0.136	1.864
9	0.337	2.970	0.337	0.808	0.184	1.816
10	0.308	3.038	0.325	0.797	0.223	1.777

注：$A_2 = \dfrac{3}{d_2\sqrt{n}}$，$D_3 = 1 - \dfrac{3d_3}{d_2}$，$D_4 = 1 + \dfrac{3d_3}{d_2}$，“—”表示不考虑．

对于 R 控制图，有

$$\begin{cases}\mathrm{CL} = \overline{R},\\ \mathrm{UCL} = D_4\overline{R},\\ \mathrm{LCL} = D_3\overline{R},\end{cases}$$

其中 D_3, D_4 为常数,可按表3-1所示选取,$\bar{R}$ 的含义同上式.

当各样本的样本量不全相等时,对于 x 控制图,有

$$\begin{cases}\mathrm{CL} = \bar{\bar{x}},\\ \mathrm{UCL} = \bar{\bar{x}} + \dfrac{3\widehat{\sigma}_R}{\sqrt{n_i}},\\ \mathrm{LCL} = \bar{\bar{x}} - \dfrac{3\widehat{\sigma}_R}{\sqrt{n_i}},\end{cases}$$

其中 $\bar{\bar{x}} = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i} x_{ij} \Big/ \sum_{i=1}^{k} n_i$;$\widehat{\sigma}_R = (\frac{1}{k})\sum_{i=1}^{k}\frac{R_i}{d_{2i}}$.

对于 R 控制图,有

$$\begin{cases}\mathrm{CL} = d_{2i}\widehat{\sigma}_R,\\ \mathrm{UCL} = (d_{2i} + d_{3i})\widehat{\sigma}_R,\\ \mathrm{LCL} = (d_{2i} - d_{3i})\widehat{\sigma}_R,\end{cases}$$

其中 d_{2i}, d_{3i} 为常数,可按表3-1所示选取;$\widehat{\sigma}_R$ 的含义同上式.如此确定三条控制线的具体理由如下.

对于取自正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$ 的样本量为 n 的样本,其 R/σ 的**分布密度**

$$f(y) = n(n-1)\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{x}^{x+y}\varphi(u)\mathrm{d}u\right)^{n-2}\varphi(x)\varphi(x+y)\mathrm{d}x,$$

其中

$$\varphi(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-\frac{u^2}{2}) \qquad (n \geqslant 2, y \geqslant 0),$$

则可推出,

$$E(R) = d_2\sigma, \quad E(R^2) = d'_2\sigma,$$
$$\sigma(R) = \sqrt{d'_2 - d_2^2}\,\sigma = d_3\sigma,$$

且常数

$$d_{2i} = \frac{E(R_i)}{\sigma}, \quad d'_{2i} = E(\frac{R_i}{\sigma})^2,$$
$$d_{3i} = \sqrt{d'_{2i} - d_{2i}^2}.$$

对于 $\bar{x}$ 图,以 $\bar{R}/d_2$ 作为 σ 的估计值,则有 $E(\bar{R}/d_2) = \sigma$.当 $n_1 = n_2 = \cdots = n_k = n$ 时,取中心线 $\mathrm{CL} = \bar{\bar{x}}$,注意到 $\bar{x} \sim N(\mu, \sigma^2/n)$,有 $\sigma(\bar{x}) = \sigma/\sqrt{n}$.由 3σ 准则,得

$$\mathrm{UCL} = \bar{\bar{x}} + \frac{3\bar{R}}{\sqrt{n}d_2} = \bar{\bar{x}} + A_2\bar{R},$$

$$\mathrm{LCL} = \bar{\bar{x}} - \frac{3\bar{R}}{\sqrt{n}d_2} = \bar{\bar{x}} - A_2\bar{R}.$$

当 $n_1, n_2, \cdots, n_k$ 不全相等时，$E(\hat{\sigma}_R) = \sigma$，故

$$\mathrm{UCL} = \bar{\bar{x}} + \frac{3}{\sqrt{n_i}}\hat{\sigma}_R,$$

$$\mathrm{LCL} = \bar{\bar{x}} - \frac{3}{\sqrt{n_i}}\hat{\sigma}_R.$$

对于 R 图，当 $n_1 = n_2 = \cdots = n_k = n$ 时，取中心线 $\mathrm{CL} = \bar{R}$，$E(\bar{R}) = d_2\sigma$，$\sigma(R) = d_3\sigma$，并以 $\bar{R}/d_2$ 估计 σ，根据 3σ 准则，有

$$\mathrm{UCL} = \bar{R} + 3d_3\frac{\bar{R}}{d_2} = \left(1 + \frac{3d_3}{d_2}\right)\bar{R} = D_4\bar{R},$$

$$\mathrm{LCL} = \bar{R} - 3d_3\frac{\bar{R}}{d_2} = \left(1 - \frac{3d_3}{d_2}\right)\bar{R} = D_3\bar{R}.$$

当 $n_1, n_2, \cdots, n_k$ 不全相等时，

$$E(R_i) = d_{2i}\sigma = d_{2i}E(\hat{\sigma}_R),$$

取中心线 $\mathrm{CL} = d_{2i}\hat{\sigma}_R$，故有

$$\mathrm{UCL} = d_{2i}\hat{\sigma}_R + 3d_{3i}\hat{\sigma}_R = (d_{2i} + 3d_{3i})\hat{\sigma}_R,$$

$$\mathrm{LCL} = d_{2i}\hat{\sigma}_R - 3d_{3i}\hat{\sigma}_R = (d_{2i} - 3d_{3i})\hat{\sigma}_R.$$

3.4.2 均值 - 标准差控制图（$\bar{x}$ - s 图）

$\bar{x}$ - s 图与 $\bar{x}$ - R 图属同一类型的控制图.

当各样本的样本量相等（$n_1 = n_2 = \cdots = n_k = n$）时，对于 $\bar{x}$ 控制图，有

$$\begin{cases} \mathrm{CL} = \bar{\bar{x}}, \\ \mathrm{UCL} = \bar{\bar{x}} + A_1^*\bar{s}, \\ \mathrm{LCL} = \bar{\bar{x}} - A_1^*\bar{s}, \end{cases}$$

其中 $\bar{s} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}s_i$；$A_1^*$ 为常数，可按表 3-2 所示选取.

对于 s 控制图，有

$$\begin{cases} \mathrm{CL} = \bar{s}, \\ \mathrm{UCL} = B_4\bar{s}, \\ \mathrm{LCL} = B_3\bar{s}, \end{cases}$$

其中 B_3, B_4 为常数，可按表 3-2 所示选取.

当各样本的样本量不相等时，对于 $\bar{x}$ 控制图，有

表3-2

样本量	A_1^*	C_2^*	$1/C_2^*$	C_3^*	B_3	B_4
2	2.659	0.7979	1.253	0.6028	—	3.267
3	1.954	0.8862	1.128	0.4632	—	2.568
4	1.628	0.9213	1.085	0.3888	—	2.266
5	1.427	0.9400	1.064	0.3412	—	2.089
6	1.287	0.9515	1.051	0.3076	0.029	1.970
7	1.182	0.9594	1.042	0.2822	0.113	1.882
8	1.099	0.9650	1.036	0.2621	0.179	1.815
9	1.032	0.9693	1.032	0.2458	0.232	1.761
10	0.975	0.9727	1.028	0.2322	0.276	1.716
11	0.927	0.9754	1.025	0.2207	0.313	1.679
12	0.886	0.9776	1.023	0.2107	0.346	1.646
13	0.850	0.9794	1.021	0.2019	0.374	1.618
14	0.817	0.9810	1.019	0.1942	0.399	1.594
15	0.789	0.9823	1.018	0.1872	0.421	1.572
16	0.763	0.9835	1.017	0.1810	0.440	1.552
17	0.739	0.9845	1.016	0.1754	0.458	1.534
18	0.718	0.9854	1.015	0.1702	0.475	1.518
19	0.698	0.9862	1.014	0.1655	0.490	1.503
20	0.680	0.9869	1.013	0.1611	0.504	1.490
> 20	$\frac{3}{\sqrt{n}}\left(1+\frac{1}{4n}\right)$	$1-\frac{1}{4n}$	$1+\frac{1}{4n}$	$\frac{1}{\sqrt{2n}}$	$1-\frac{3}{\sqrt{2n}}$	$1+\frac{3}{\sqrt{2n}}$

注：$A_1^* = \frac{3}{C_2^* \sqrt{n}}$，$B_3 = 1 - \frac{3C_3^*}{C_2^*}$，$B_4 = 1 + \frac{3C_3^*}{C_2^*}$，"–"表示不考虑。

$$\begin{cases} CL = \bar{\bar{x}}, \\ UCL = \bar{\bar{x}} + \frac{3\hat{\sigma}_s}{\sqrt{n_i}}, \\ LCL = \bar{\bar{x}} - \frac{3\hat{\sigma}_s}{\sqrt{n_i}}, \end{cases}$$

其中

$$\bar{\bar{x}} = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} x_{ij} \Big/ \sum_{i=1}^{k} n_i ;$$

$$\widehat{\sigma}_s = \left(\frac{1}{k}\right)\sum_{i=1}^{k}\frac{s_i}{C_{2i}^*}.$$

对于 s 控制图,有

$$\begin{cases}\text{CL} = C_{2i}^*\widehat{\sigma}_s,\\ \text{UCL} = (C_{2i}^* + 3C_{3i}^*)\widehat{\sigma}_s,\\ \text{LCL} = (C_{2i}^* - 3C_{3i}^*)\widehat{\sigma}_s,\end{cases}$$

其中 C_{2i}^*、C_{3i}^* 为常数,可按表 3-2 所示选取 .

因为对于取自正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$ 的样本量为 n 的样本,其 s/σ 的分布密度

$$f(y) = \frac{n^{(n-1)/2}}{2^{(n-3)/2}\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}y^{n-2}\exp\left(-\frac{ny^2}{2}\right) \qquad (n \geqslant 2, y > 0),$$

则 s 的数学期望和标准差分别为

$$E(s) = \frac{\sqrt{\frac{2}{n-1}}\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)\sigma}{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)} = C_2^*\sigma,$$

$$\sigma(s) = \sqrt{1 - C_2^{*2}}\sigma = C_3^*\sigma.$$

类似于 3.4.1 小节中的推导就可得常数 A_1^*, B_3, B_4, C_{2i}^*、C_{3i}^* 的表达式:

$$A_1^* = \frac{3}{C_2^*\sqrt{n}},$$

$$B_4 = 1 + \frac{3C_3^*}{C_2^*}, \quad B_3 = \left(1 - \frac{3C_3^*}{C_2^*}\right),$$

$$C_{2i}^* = \sqrt{\frac{2}{n_i - 1}}\frac{\Gamma\left(\frac{n_i}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n_i - 1}{2}\right)}, \quad C_{3i}^* = \sqrt{1 - C_{2i}^{*2}}.$$

3.4.3　中位数 - 极差控制图($\tilde{x}$ -R 图)

$\tilde{x}$ -R 控制图与 $\bar{x}$-R 控制图和 $\bar{x}$-s 控制图也属同一类型控制图,但它比 x-R 控制图和 $\bar{x}$-s 控制图更为简便可行 .

记 $\tilde{x}_i$ 为第 i 个样本的中位数,即

$$\tilde{x}_i = \begin{cases}\frac{1}{2}(x_{i(m)} + x_{i(m+1)}) & (n_i = 2m, i = 1,2,\cdots,k),\\ x_{i(m)} & (n_i = 2m+1).\end{cases}$$

当各样本的样本量相等时,对于 $\tilde{x}$ 控制图,有

$$\begin{cases} CL = \bar{\tilde{x}}, \\ UCL = \bar{\tilde{x}} + m_3 A_2 \bar{R}, \\ LCL = \bar{\tilde{x}} - m_3 A_2 \bar{R}, \end{cases}$$

其中 $\bar{\tilde{x}} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\tilde{x}_i$；$m_3, A_2$ 为常数，可按表 3-3 所示选取.

表 3-3

样本量	m_3	m_3A_2	d_2	$1/d_2$	d_3	D_3	D_4
2	1.000	1.880	1.128	0.886	0.853	—	3.267
3	1.160	1.187	1.693	0.591	0.888	—	2.575
4	1.092	0.796	2.059	0.486	0.880	—	2.282
5	1.198	0.691	2.326	0.430	0.864	—	2.115
6	1.135	0.549	2.534	0.395	0.848	—	2.004
7	1.214	0.509	2.704	0.370	0.833	0.076	1.924
8	1.160	0.432	2.847	0.351	0.820	0.136	1.864
9	1.223	0.412	2.970	0.337	0.808	0.184	1.816
10	1.176	0.363	3.078	0.325	0.797	0.223	1.777

注：$A_2 = \frac{3}{d_2\sqrt{n}}$，$D_3 = 1 - \frac{3d_3}{d_2}$，$D_4 = 1 + \frac{3d_3}{d_2}$，"—"表示不考虑.

对于 R 控制图，有

$$\begin{cases} CL = \bar{R}, \\ UCL = B_4 R, \\ LCL = B_3 \bar{R}. \end{cases}$$

当各样本的样本量不相等时，对于 $\tilde{x}$ 控制图，有

$$\begin{cases} CL = \bar{\tilde{x}}, \\ UCL = \bar{\tilde{x}} + \frac{3m_3\hat{\sigma}_R}{\sqrt{n_i}}, \\ LCL = \bar{\tilde{x}} - \frac{3m_3\hat{\sigma}_R}{\sqrt{n_i}}, \end{cases}$$

其中

$$\bar{\tilde{x}} = \sum_{i=1}^{k} n_i \tilde{x}_i \Big/ \sum_{i=1}^{k} n_i.$$

对于 R 控制图，有

$$\begin{cases} \text{CL} = d_{2i}\widehat{\sigma}_R, \\ \text{UCL} = (d_{2i} + 3d_{3i})\widehat{\sigma}_R, \\ \text{LCL} = (d_{2i} - 3d_{3i})\widehat{\sigma}_R. \end{cases}$$

因为对于取自正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$ 的样本量为 $n_i(n_i = 2m+1)$ 的样本，样本中位数为 $\tilde{x}$，则 $\xi = (\tilde{x} - \mu)/\sigma$ 的分布密度

$$f(y) = \frac{(2m+1)!}{(m!)^2}(\Phi(y))^m(1-\varphi(y))^m\varphi(y),$$

其中 $\varphi(y)$，$\Phi(y)$ 分别为标准正态分布 $N(0,1)$ 的分布密度与分布函数．由于 $E(\xi)$ 和 $\sigma(\xi)$ 一般不能精确求出，但近似地有

$$E(\xi) \approx 0, \quad \sigma(\xi) \approx \frac{m_3}{\sqrt{n_i}},$$

于是，$\tilde{x}$ 的数学期望和标准差分别为

$$E(\tilde{x}) \approx 0, \quad \sigma(\tilde{x}) \approx \frac{m_3}{\sqrt{n_i}}\sigma.$$

m_3 的值按表 3-3 所示选取．且当 $n_i > 10$ 时，近似地有

$$m_3 \approx \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(1 - \frac{4-\pi}{4n_i}\right) & (\text{当 } n_i \text{ 为奇数时}); \\ \sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(1 - \frac{6-\pi}{4n_i+1}\right) & (\text{当 } n_i \text{ 为偶数时}). \end{cases}$$

各中心线和上下界的推导与 3.4.1 小节的类似．

3.4.4 单值-滑动极差控制图（x-R_m 图）

单值-滑动极差控制图主要用于数据不能分组的情况．设 x_j 为第 j 个观测值，R_{mj} 为第 j 个滑动极差，n 为观测值的个数，并记

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_j,$$

$$R_{mj} = |x_{j+1} - x_j| \qquad (j = 1,2,\cdots,n-1),$$

$$\bar{R}_m = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n-1} R_{mj},$$

则对于 x 控制图，有

$$\begin{cases} \text{CL} = \bar{x}, \\ \text{UCL} = \bar{x} + 2.66\bar{R}_m, \\ \text{LCL} = \bar{x} - 2.66\bar{R}_m, \end{cases}$$

其中 $2.66 \approx 3/d_2$（d_2 取 $n = 2$ 时的值）．

对于 R_m 控制图，有

$$\begin{cases} \mathrm{CL} = \bar{R}_m, \\ \mathrm{UCL} = 3.27\bar{R}_m, \\ \mathrm{LCL} = \text{不考虑}, \end{cases}$$

其中

$$3.27 \approx D_4 \quad (D_4 \text{ 取 } n = 2 \text{ 时的值}).$$

3.4.5　不合格品率控制图(p 图)

设 f_i 为第 i 个样本的不合格品数,并记

$$p_i = \frac{f_i}{n_i} \qquad (i = 1,2,\cdots,k);$$

$$\bar{p} = \frac{\sum_{i=1}^{k} f_i}{\sum_{i=1}^{k} n_i} = \frac{\sum_{i=1}^{k} n_i p_i}{\sum_{i=1}^{k} n_i},$$

则对于 p 控制图,有

$$\begin{cases} \mathrm{CL} = \bar{p}, \\ \mathrm{UCL} = \bar{p} + 3\sqrt{\dfrac{\bar{p}(1-\bar{p})}{n_i}}, \\ \mathrm{LCL} = \left(\bar{p} - 3\sqrt{\dfrac{\bar{p}(1-\bar{p})}{n_i}}\right)^{+}, \end{cases}$$

其中上标 + 表示当 $\bar{p} \geqslant 3\sqrt{\dfrac{\bar{p}(1-\bar{p})}{n_i}}$ 时,取 $\bar{p} - 3\sqrt{\dfrac{\bar{p}(1-\bar{p})}{n_i}}$;否则取 0.

设在稳定生产工序中不合格品率为 p',从中抽取大小为 n 的样本,其中不合格品数 f 服从二项分布 $B(n,p')$,则不合格品数的均值 f/n 为 p',标准差为 $\sqrt{p'(1-p')/n}$.由于 p' 一般未知,可用 k 组大小分别为 n_i 的样本数据来作估计,即用 $p' \sim \bar{p}$,则 f/n 的均值估计为 $\bar{p}$,标准差估计为 $\sqrt{\bar{p}(1-\bar{p})/n}$,于是,仿照计量控制图的 3σ 准则,得到 p 图的控制限与中心线.

当 $\bar{p}$ 较小而 $n_i\bar{p} \geqslant 0.16$ 时,可对 UCL 和 LCL 作适当的修改,使得控制图犯第一类错误的概率尽量接近标准化之值 0.27%.对 UCL 和 LCL 作适当的修改,得改进的 p 控制图,对于改进的 p 控制图,有

$$\begin{cases} \mathrm{CL} = \bar{p}, \\ \mathrm{UCL} = \bar{p} + 3\sqrt{\dfrac{\bar{p}(1-\bar{p})}{n_i}} + \dfrac{1.2}{n_i}, \\ \mathrm{LCL} = \bar{p} - 3\sqrt{\dfrac{\bar{p}(1-\bar{p})}{n_i}} + \dfrac{1.2}{n_i}. \end{cases}$$

由于上述 p 图(或改进的 p 图)都随 n_i 的变化而变化,实际应用时比较麻烦,而

$\bar{n}/2 \leqslant \min\{n_i\} \leqslant \max\{n_i\} \leqslant \bar{n}$,其中 $\bar{n} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} n_i$,可近似地将上述 p 图或改进的 p 图中的 n_i 用 $\bar{n}$ 代替.

3.4.6 不合格品数控制图(pn 图)

仍记 f_i 为第 i 个样本的**不合格品数**,$\bar{f} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} f_i = pn$ 为样本不合格品数均值,由 3.4.5 小节可知,对于 pn 控制图,有

$$\begin{cases} \mathrm{CL} = \bar{f}, \\ \mathrm{UCL} = \bar{p} + 3\sqrt{\dfrac{\bar{f}(1-\bar{p})}{n_i}}, \\ \mathrm{LCL} = \left(\bar{p} - 3\sqrt{\dfrac{\bar{f}(1-\bar{p})}{n_i}}\right)^{+}, \end{cases}$$

其中 $\bar{p}, \bar{n}$ 含义同 3.4.5 小节.

3.4.7 单位缺陷数控制图(u 图)

设 u_i 为第 i 个单位**缺陷数**,c_i 为其缺陷总数,记

$$\begin{cases} u_i = \dfrac{c_i}{n_i} \qquad (i = 1,2,\cdots,k), \\ \bar{u} = \dfrac{\sum_{i=1}^{k} c_i}{\sum_{i=1}^{k} n_i}, \end{cases}$$

则对于 u 控制图,有

$$\begin{cases} \mathrm{CL} = \bar{u}, \\ \mathrm{UCL} = \bar{u} + 3\sqrt{\dfrac{\bar{u}}{n_i}}, \\ \mathrm{LCL} = \left(\bar{u} - 3\sqrt{\dfrac{\bar{u}}{n_i}}\right)^{+} \qquad (i = 1,2,\cdots,k). \end{cases}$$

设在稳定生产工序中平均缺陷数为 u',从中抽取样本量为 n 的样本,其中缺陷数 c 遵从泊松(S.D.Poisson)分布 $P(u'n)$,则 c/n 的均值为 u',标准差为 $\sqrt{u'/n}$,由于 u' 一般未知,故采用 $\bar{u}$ 来作估计.根据控制图的 3σ 准则,即得 u 图.当 $\bar{u}$ 较小,且 $n_i\bar{u}^2 \geqslant 0.2$ 时,可得改进的 u 图,对于改进的 u 控制图,有

$$\begin{cases} \mathrm{CL} = \bar{u}, \\ \mathrm{UCL} = \bar{u} + 3\sqrt{\dfrac{\bar{u}}{n_i}} + \dfrac{4}{3n_i}, \\ \mathrm{LCL} = \bar{u} - 3\sqrt{\dfrac{\bar{u}}{n_i}} + \dfrac{4}{3n_i}. \end{cases}$$

3.4.8 缺陷数控制图(c 图)

仍记 c_i 为其缺陷总数,$\bar{c} = (1/k)\sum_{i=1}^{k} c_i$. 由 3.4.7 小节中所述,得 c 图. 对于 c 控制图,有

$$\begin{cases} \mathrm{CL} = \bar{c}, \\ \mathrm{UCL} = \bar{c} + 3\sqrt{\bar{c}}, \\ \mathrm{LCL} = \bar{c} - 3\sqrt{\bar{c}}. \end{cases}$$

4 计数抽样检验

判断一批产品是否合格时,只计算样本中不合格品数或缺陷数的抽样检验方法称为计数抽样检验.

4.1 计数一次抽样检验

计数一次抽样检验是最简单的计数抽样检验. 从批量为 N 的产品中随机抽取 n 个单位产品(n 称样本量,一般 $n < N$),同时规定一个合格判定数 A(A 为非负整数,它表示当判断为合格批时,样本中允许的最大不合格品数或缺陷数),统计 n 个单位产品中的不合格品数或缺陷数 d,并采用如下的判断规则:

$$\begin{cases} \text{当 } d \leqslant A \text{ 时,} & \text{接收此批;} \\ \text{当 } d > A \text{ 时,} & \text{拒收此批.} \end{cases}$$

这种的抽样检验方法称为计数一次抽样检验. 用符号$(N, n \mid A)$或$(n \mid A)$表示计数一次抽样检验方案.

4.1.1 接收概率及其 OC 曲线

1. 接收概率

设产品的批量为 N,批的真实不合格品率为 p,抽样方案为$(N, n \mid A)$,则称随机事件"$d \leqslant A$"的概率为**接收概率**或批被判为合格的概率,记为 $L(p)$,即有

$$L(p) = P\{d \leqslant A\} = \sum_{i=0}^{A} P\{d = i\}.$$

由于抽样是随机的,故样本中的不合格品数 d 是一个离散型随机变量.

2. OC 曲线

对于既定的抽样方案$(n \mid A)$而言,人们所关心的问题是这个方案是好还是不好. 因此就必须了解接收概率 $L(p)$ 与不合格品率 p 的关系. 以 p 为横坐标、$L(p)$ 为纵坐标画一条曲线,这条曲线称之为**抽样方案**$(n \mid A)$的**操作特性曲线**(简称 **OC 曲线**). 它表示使用既定的抽样方案,把一定质量水平的一批产品预期判为接收的百分比.

3. 接收概率或 OC 曲线的计算

设产品的批量为 N，其不合格品率为 p，则该批产品中的真实不合格品数 $D \approx Np$，在不返回抽样的情形下，d 服从超几何分布，即

$$P\{d = i\} = \frac{\binom{D}{i}\binom{N-D}{n-i}}{\binom{N}{n}} \xlongequal{\text{def}} h(i \mid n, D, N) \quad (i = 0, 1, 2, \cdots, \min(D, n)).$$

于是得抽样方案$(n \mid A)$下的接收概率

$$L(p) = \sum_{i=0}^{A} h(i \mid n, D, N) = \sum_{i=0}^{A} \frac{\binom{D}{i}\binom{N-D}{n-i}}{\binom{N}{n}}. \tag{4-1}$$

当 N 很大，$n/N \leqslant 0.10$ 时，超几何分布可用二项分布近似，且当 $n \leqslant D$ 时，有

$$h(i \mid n, D, N) \approx \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i} \xlongequal{\text{def}} b(i \mid n, p),$$

则

$$L(p) \approx \sum_{i=0}^{A} b(i \mid n, p), \quad D \approx Np. \tag{4-2}$$

式(4-2)称为二项式近似．当 $n > D$ 时，则有

$$L(p) \approx \sum_{i=0}^{A} b(i \mid D, f) = \sum_{i=0}^{A} \binom{D}{i} f^i (1-f)^{D-i}, \tag{4-3}$$

其中 $f = n/N$，式(4-3)称为 f 二项式近似．

当 N 很大，$n/N < 0.10$，$p < 0.10$ 时，超几何分布可用 n 分布近似，即

$$\binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i} \approx \frac{\lambda^i}{i!} \exp(-\lambda) \xlongequal{\text{def}} P(i, \lambda).$$

这时，

$$L(p) \approx \sum_{i=0}^{A} \frac{\lambda^i}{i!} \exp(-\lambda),$$

其中

$$\lambda = np.$$

一般来说，当 $N \leqslant 100$ 时，最好用超几何分布形式来计算 $L(p)$；当 $N > 100$ 且 $n/N \leqslant 0.10$ 时，用二项分布来计算 $L(p)$；当 $N > 100$ 且 $n/N < 0.10$，$p < 0.10$ 时，可用泊松分布来计算 $L(p)$．

当 $N = 1000$，抽样方案为$(50 \mid 1)$时，可采用二项分布来计算接收概率，p 与 $L(p)$ 的对应值如表 4-1 所示，OC 曲线如图 4-1 所示．

表 4-1

p/%	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$L(p)$	1	0.91	0.74	0.56	0.40	0.28	0.19	0.13	0.08	0.05	0.03

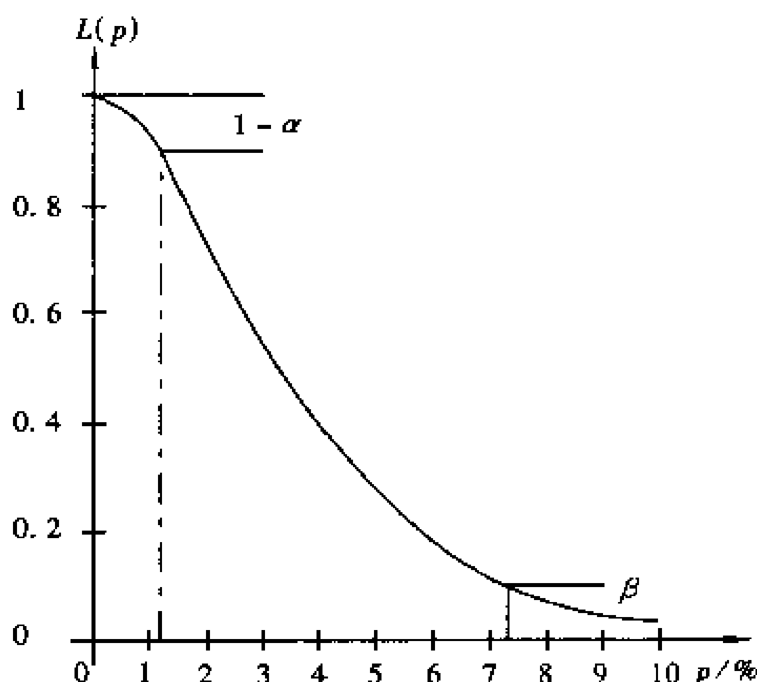


图4-1

4.OC曲线的变化规律

对于给定的抽样方案,OC曲线是唯一确定的．但对于不同的抽样方案,就有着不同的OC曲线．从接收概率的计算公式中可以看到,OC曲线的变化依赖于三个参数:批量 N,样本量 n,合格判定数 A．在其余两个参数不变的情况下,n 越大,抽样方案越严格;或者 A 越小,抽样方案越严格;或者 N 越小,抽样方案越严格．

4.1.2 抽样方案中的两类错误

抽样检验是由部分样品的信息去推断整批产品的质量,即由局部信息推断全局属性的方法,这难免要犯小概率错误．这种错误有两类．

第一类错误是,把本来合格的产品批,通过抽样检验判为不合格的产品批．通常用 α 表示犯第一类错误的概率．第一类错误亦称为弃真错误或**供货方风险**．在既定抽样方案$(N,n \mid A)$之下,若所规定产品批的不合格品率为 p_0,则犯第一类错误的概率可表为 $\alpha = 1 - L(p_0)$．若用泊松分布形式来表示,则有

$$\alpha = 1 - \sum_{i=0}^{A} \frac{(np_0)^i}{i!} e^{-np_0}.$$

第二类错误是把本来不合格的产品批,通过抽样检验判为合格的产品批．通常用 β 表示犯第二类错误的概率．第二类错误亦称为取伪错误或**订货方风险**．在既定抽样方案$(N,n \mid A)$之下,若所规定产品批的不合格品率为 P_1,则犯第二类错误的概率可表为 $\beta = L(p_1)$．若用泊松分布形式来表示,则有

$$\beta = \sum_{i=0}^{A} \frac{(np_1)^i}{i!} e^{-np_1}.$$

4.2 计数二次抽样检验

一次抽样方案包括2个参数 n 和 A，二次抽样方案则包括5个参数 n_1, n_2, A_1, R_1, A_2，其中 n_1 为第一抽检量，d_1 为其中的不合格品数；n_2 为第二抽检量，d_2 为其中的不合格品数；A_1 为第一合格判定数，R_1 为第一不合格判定数；A_2 为第二合格判定数．

二次抽样的程序是，设产品批量为 N，第一次抽取样本量为 n_1 的样本，若 $d_1 \leqslant A_1$，则判为合格批；若 $d_1 \geqslant R_1$，则判为不合格批；若 $A_1 < d_1 < R_1$，则不能作出判断，继续抽取样本量为 n_2 的第二样本．若 $d_1 + d_2 \leqslant A_2$，则判为合格批；若 $d_1 + d_2 > A_2$，则判为不合格批．通常用记号 $(n_1, n_2 \mid A_1, R_1, A_2)$ 表示二次抽样方案．

二次抽样方案的程序如图4-2所示．

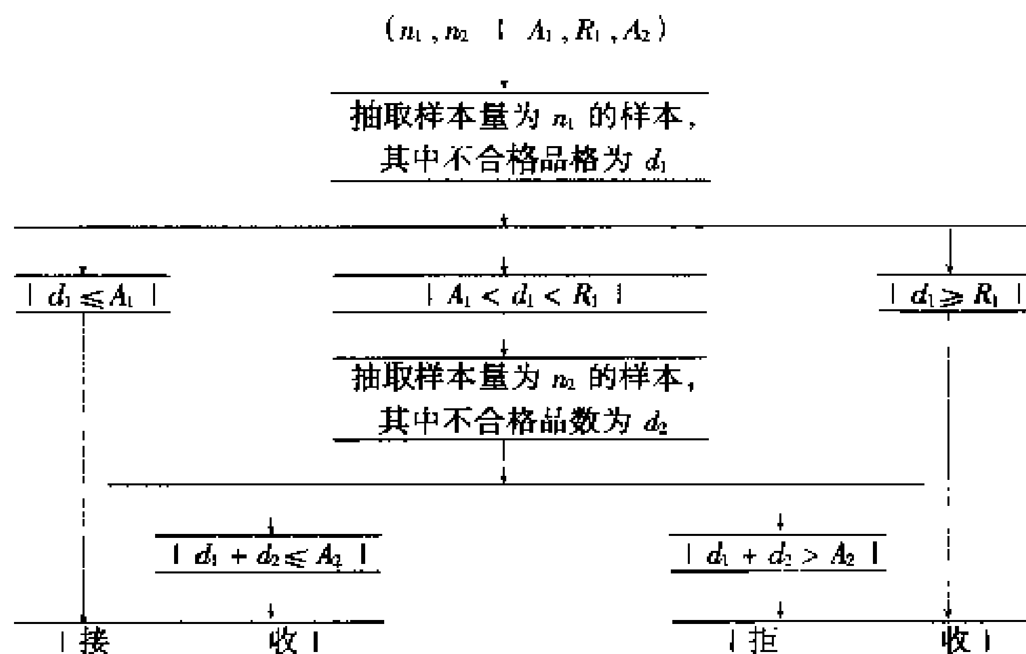


图4-2

接收概率及其OC的计算如下．

设产品批量为 N，不合格品率为 p，根据计数二次抽样的程序可知，当第一样本中的不合格品数 $d_1 \leqslant A_1$ 时，接收此批；如果 $A_1 < d_1 < R_1$，则需要抽取第二样本，若 $d_1 + d_2 \leqslant A_2$，仍判为接收此批．所以，接收概率是上述两种情况的概率和．

(1) 记第一次抽样的接收概率为 $L_1(p)$，则有

$$L_1(p) = \sum_{i_1=0}^{A_1} \frac{\binom{D}{i_1}\binom{N-D}{n_1-i_1}}{\binom{N}{n_1}},$$

其中

$$D \approx Np.$$

(2) 记第二次抽样的接收概率为 $L_2(p)$, $L_2(p)$ 就是随机事件"$A_1 < d_1 < R_1$ 且 $d_1 + d_2 \leqslant A_2$"的概率．这一事件的全部可能为"$d_1 = A_1 + 1$ 且 $d_2 \leqslant A_2 - A_1 - 1$"; "$d_1 = A_1 + 2$ 且 $d_2 \leqslant A_2 - A_1 - 2$"; …; "$d_1 = R_1 - 1$ 且 $d_2 \leqslant A_2 - R_1 + 1$". 因此,

$$L_2(p) = \sum_{i_1 = A_1+1}^{R_1-1}\left(\frac{\binom{D}{i_1}\binom{N-D}{n_1-i_1}}{\binom{N}{n_1}} \times \sum_{i_2=0}^{A_2-i_1}\frac{\binom{D-i_1}{i_2}\binom{N-n_1-D+i_1}{n_2-i_2}}{\binom{N-n_1}{n_2}}\right).$$

由上述可知,计数二次抽样方案的接收概率

$$L(p) = L_1(p) + L_2(p) = \sum_{i_1=0}^{A_1}\frac{\binom{D}{i_1}\binom{N-D}{n_1-i_1}}{\binom{N}{n_1}} + \sum_{i_1=A_1+1}^{R_1-1}\left(\frac{\binom{D}{i_1}\binom{N-D}{n_1-i_1}}{\binom{N}{n_1}} \times \sum_{i_2=0}^{A_2-i_1}\frac{\binom{D-i_1}{i_2}\binom{N-n_1-D+i_1}{n_2-i_2}}{\binom{N-n_1}{n_2}}\right).$$

当 N 很大, $n_1/N < 0.10$, $n_2/N < 0.10$ 时,超几何分布可用二项分布或泊松分布近似,于是有 $L(p) = \sum_{i_1=0}^{A_1} b(i_1 \mid n_1, p) + \sum_{i_1=A_1+1}^{R_1-1}\left(b(i_1 \mid n_1, p)\sum_{i_2=0}^{A_2-i_1} b(i_2 \mid n_2, p)\right)$

和

$$L(p) = \sum_{i_1=0}^{A_1} P(i_1 \mid n_1 p) + \sum_{i_1=A_1+1}^{R_1-1}\left(P(i_1 \mid n_1 p)\sum_{i_2=0}^{A_2-i_1} P(i_2 \mid n_2 p)\right).$$

在计数二次抽样方案中,仅 n_1 是固定的,而 n_2 是随机的．若第一样本信息能够作出接收或拒收的判断,则不需要第二样本;否则,就需抽第二样本,再据两样本的累计信息作出判断,故对计数二次抽样方案来说,需要考虑**平均抽检量**,通常用 ASN 表示．

$$\mathrm{ASN} = n_1(P\{d_1 \leqslant A_1\} + P\{d_1 \geqslant R_1\}) + (n_1 + n_2)P\{A_1 < d_1 < R_1\}.$$

如用泊松分布的形式表示,则有

$$\text{ASN} = n_1 + n_2 \sum_{i_1 = A_1 + 1}^{R_1 - 1} P(i_1 \mid n_1 p).$$

对于所有可能的 p,可画出以 ASN 为纵坐标的曲线(ASN 曲线),其一般形式如图 4-3 所示.

在泊松分布近似情况下,ASN 达到最大值的不合格品率的 p_m 值为

$$p_m = \exp\left(\frac{\log((A_1+1)\cdots(R_1-1))}{R_1 - A_1 - 1} - \log n_1\right).$$

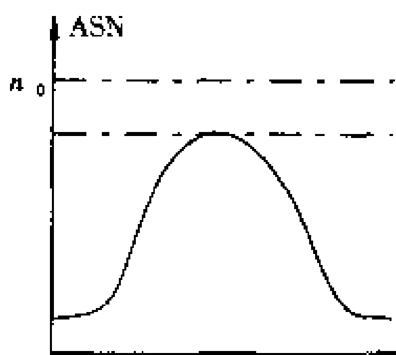


图 4-3

一般如果二次抽样方案选得合适,可以使它与一次抽样方案的 OC 曲线基本相同,但是二次抽样方案的平均抽检量 ASN 比第一次抽检方案的 ASN 一致地小.通常一个抽样方案样本个数越多,ASN 越小,实施起来越麻烦,所以实际中用得较多的是二次抽样方案.此外还有计数多次抽样检验,限于篇幅这里不介绍了.

抽样方案中的参数又如何确定呢?这涉及建立抽样方案的准则.通常的准则分为三类:标准型准则、挑选型准则、调整型准则.

4.3 计数标准型一次抽样方案

4.3.1 标准型一次抽样方案的确定方法

首先指定一个批不合格品率 p_0,称为**合格质量**(也称生产方质量水平或接收上界).在选择抽样方案时,必须保证小于或等于 p_0 的产品批要以不低于 $1-\alpha$ 的高概率接收,α(常取 0.01,0.05 等值)称为生产方的风险.然后,再指定一个批不合格品率 p_1,称为**极限质量**(也称使用方质量水平或拒绝下界).在选择抽样方案时,要以不超过 β 的低概率接收,β(可取 0.05,0.10 等值),称为使用方的风险.

这样,可建立一个抽样方案.其判断规则为

$$\begin{cases} p \leqslant p_0 \text{ 时,以不低于 } 1-\alpha \text{ 的概率接收;} \\ p \geqslant p_1 \text{ 时,以不超过 } \beta \text{ 的概率接收,} \end{cases}$$

其中 $p_0 \leqslant p_1$;p 为产品的批不合格率.

设产品的批量为 N,不合格率为 p,从批中随机抽取样本量为 n 的样本,其中不合格品数为 d,由抽样方案的目标和判断规则,有

$$\begin{cases} P\{d \leqslant A\} = 1-\alpha & (\text{当 } p = p_0 \text{ 时}), \\ P\{d \leqslant A\} = \beta & (\text{当 } p = p_1 \text{ 时}). \end{cases}$$

即 $L(p_0) = 1-\alpha$;$L(p_1) = \beta$.用泊松分布形式表示,则有

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{i=0}^{A} \frac{(np_0)^i}{i!} \exp(-np_0) = 1-\alpha, \\ \displaystyle\sum_{i=0}^{A} \frac{(np_1)^i}{i!} \exp(-np_1) = \beta. \end{cases}$$

这里 α,β,p_0,p_1 为已知,因而可以确定 n 和 A 的值．为了方便,对于样本中不合格品数为泊松分布情形时的几种不同的 α,β,可制作出如表4-2所示的抽样方案(n | A)的选择表．对于服从二项分布的情形,也可制作类似的表．

表4-2

	p_1/p_0			np_0		p_1/p_0			np_0
A	$\alpha=0.05$ $\beta=0.10$	$\alpha=0.05$ $\beta=0.05$	$\alpha=0.05$ $\beta=0.01$	$\alpha=0.05$	A	$\alpha=0.01$ $\beta=0.10$	$\alpha=0.01$ $\beta=0.05$	$\alpha=0.01$ $\beta=0.01$	$\alpha=0.01$
0	44.890	58.404	89.791	0.052	0	229.105	298.073	458.210	0.010
1	10.946	13.349	16.681	0.355	1	20.184	31.933	44.686	0.149
2	6.509	7.699	10.280	0.818	2	12.206	14.439	19.278	0.436
3	4.490	5.675	7.352	1.366	3	8.115	9.418	12.202	0.823
4	4.057	4.646	5.890	1.970	4	6.249	7.156	9.072	1.279
5	3.549	4.023	5.017	2.613	5	5.195	5.889	7.343	1.785
6	3.206	3.604	4.435	3.286	6	4.520	5.082	6.253	2.330
7	2.957	3.303	4.019	3.981	7	4.050	4.524	5.506	2.906
8	2.768	3.074	3.707	4.695	8	3.705	4.115	4.962	3.507
9	2.618	2.895	3.462	5.426	9	3.440	3.803	4.548	4.130
10	2.497	2.750	3.265	6.169	10	3.229	3.555	4.222	4.771
11	2.397	2.630	3.104	6.924	11	3.058	3.354	3.959	5.428
12	2.312	2.528	2.968	7.690	12	2.915	3.188	3.742	6.099
13	2.240	2.442	2.852	8.464	13	2.795	3.047	3.559	6.782
14	2.177	2.367	2.752	9.246	14	2.692	2.927	3.403	7.477
15	2.122	2.302	2.665	10.035	15	2.603	2.823	3.269	8.181
16	2.073	2.244	2.588	10.831	16	2.524	2.732	3.153	8.895
17	2.029	2.192	2.520	11.633	17	2.455	2.652	3.048	9.616
18	1.990	2.145	2.458	12.442	18	2.393	2.580	2.956	10.346
19	1.954	2.103	2.403	13.254	19	2.337	2.516	2.847	11.032
20	1.922	2.065	2.352	14.072	20	2.287	2.458	2.799	11.825
21	1.892	2.030	2.307	14.894	21	2.241	2.405	2.733	12.574
22	1.865	1.999	2.265	15.719	22	2.200	2.357	2.671	13.329
23	1.840	1.969	2.226	16.548	23	2.162	2.313	2.615	14.088
24	1.817	1.942	2.191	17.382	24	2.126	2.272	2.564	14.853
25	1.795	1.917	2.158	18.218	25	2.094	2.235	2.516	15.623
26	1.775	1.893	2.127	19.058	26	2.064	2.200	2.472	16.397
27	1.757	1.871	2.098	19.900	27	2.035	2.168	2.431	17.175
28	1.739	1.850	2.071	20.746	28	2.009	2.138	2.393	17.957
29	1.723	1.831	2.046	21.594	29	1.985	2.110	2.358	18.742
30	1.707	1.813	2.023	22.444	30	1.962	2.083	2.324	19.532

4.3.2 计数标准型一次抽样标准 JIS—Z—9002

JIS—Z—9002 是日本制定的计数标准型一次抽样标准,它由两部分构成:一部分是标准型一次抽样表,如表4-3所示;另一部分是抽样方案辅助表,如表4-4($\alpha = 0.05, \beta = 0.10$) 所示．其使用程序如下:

(1) 指定合格质量 p_0 与极限质量 p_1($p_0 < p_1$);

(2) 在表 4-3 中找到含有 p_0 的行与含有 p_1 的列的交叉栏,交叉栏中左侧的整数为样本量 n,在其右侧的括号内的数值为合格判定数 A;

(3) 在交叉栏中遇见"↑"或"↓"或"←"或"→"时,要按箭头指向寻找,直至见到 n, A 值为止;

(4) 在交叉栏中遇见"*"时,则使用表 4-4 所示的 n, A 值.

表 4-3

p_1/% p_0/%	0.71 ~ 0.90	0.91 ~ 1.12	1.13 ~ 1.40	1.41 ~ 1.80	1.81 ~ 2.24	2.25 ~ 2.80	2.81 ~ 3.55	3.56 ~ 4.50
0.090 ~ 0.112	*	400(1)	↓	←	↓	→	60(0)	50(0)
0.113 ~ 0.140	*	↓	300(1)	↓	←	↓	→	↑
0.141 ~ 0.180	*	500(2)	↓	250(1)	↓	←	↓	→
0.181 ~ 0.224	*	*	400(2)	↓	200(1)	↓	←	↓
0.225 ~ 0.280	*	*	500(3)	300(2)	↓	150(1)	↓	←
0.281 ~ 0.355	*	*	*	400(3)	250(2)	↓	120(1)	↓
0.356 ~ 0.450	*	*	*	500(4)	300(3)	200(2)	↓	100(1)
0.451 ~ 0.560	*	*	*	*	400(4)	250(3)	150(2)	↓
0.561 ~ 0.710	*	*	*	*	500(6)	300(4)	200(3)	120(2)
0.711 ~ 0.900	*	*	*	*	*	400(6)	500(4)	150(3)
0.901 ~ 1.12		*	*	*	*	*	300(6)	200(4)
1.13 ~ 1.40			*	*	*	*	500(10)	250(6)
1.41 ~ 1.80				*	*	*	*	400(10)
1.81 ~ 2.24					*	*	*	*
2.25 ~ 2.80						*	*	*
2.81 ~ 3.55							*	*
3.56 ~ 4.50								*
4.51 ~ 5.60								
5.61 ~ 7.10								
7.11 ~ 9.00								
9.01 ~								

· 续表

p_1/% ～ p_0/%	4.51 ～ 5.60	5.61 ～ 7.10	7.11 ～ 9.00	9.01 ～ 11.2	11.3 ～ 14.0	14.1 ～ 18.0	18.1 ～ 22.4	22.5 ～ 28.0	28.1 ～ 35.5
0.090 ～ 0.112	←	↓	↓	←	↓	↓	↓	↓	↓
0.113 ～ 0.140	40(0)	←	↓	↓	←	↓	↓	↓	↓
0.141 ～ 0.180	↑	30(0)	←	↓	↓	←	↓	↓	↓
0.181 ～ 0.224	→	↑	25(0)	←	↓	↓	←	↓	↓
0.225 ～ 0.280	↓	→	↑	20(0)	←	↓	↓	←	↓
0.281 ～ 0.355	←	↓	→	↑	15(0)	←	↓	↓	←
0.356 ～ 0.450	↓	←	↓	→	↑	15(0)	←	↓	↓
0.451 ～ 0.560	80(1)	↓	←	↓	→	↑	10(1)	←	↓
0.561 ～ 0.710	↓	60(1)	↓	←	↓	→	↑	7(0)	←
0.711 ～ 0.900	100(2)	↓	50(1)	↓	←	↓	→	↑	5(0)
0.901 ～ 1.12	120(3)	80(2)	↓	40(1)	↓	←	↓	↑	↑
1.13 ～ 1.40	150(4)	100(3)	60(2)	↓	30(1)	↓	←	↓	↑
1.41 ～ 1.80	200(6)	120(4)	80(3)	40(2)	↓	25(1)	↓	←	↓
1.81 ～ 2.24	300(10)	150(6)	100(4)	60(3)	40(2)	↓	20(1)	↓	←
2.25 ～ 2.80	*	250(10)	120(6)	70(4)	50(3)	30(2)	↓	15(1)	↓
2.81 ～ 3.55	*	*	200(10)	100(6)	60(4)	40(3)	25(2)	↓	10(1)
3.56 ～ 4.50	*	*	*	150(10)	80(6)	50(4)	30(3)	20(2)	↓
4.51 ～ 5.60	*	*	*	*	120(10)	60(6)	40(4)	25(3)	15(2)
5.61 ～ 7.10		*	*	*	*	100(10)	50(6)	30(4)	20(3)
7.11 ～ 9.00			*	*	*	*	70(10)	40(6)	25(4)
9.01 ～				*	*	*	*	60(10)	30(6)

注:400(1) 表示 n = 400, A = 1;箭头表示采用其所示方向的最近的抽样方案(α = 0.05, β = 0.10).

表 4-4

p_1/p_0	A	n
17 以上	0	$1.56/p_0+115/p_1$
16 ~ 7.9	1	$17.8/p_0+194/p_1$
7.8 ~ 5.6	2	$40.9/p_0+266/p_1$
5.5 ~ 4.4	3	$68.3/p_0+334/p_1$
4.3 ~ 3.6	4	$98.5/p_0+400/p_1$
3.5 ~ 2.8	6	$164/p_0+527/p_1$
2.7 ~ 2.3	10	$308/p_0+770/p_1$
2.2 ~ 2.0	15	$502/p_0+1\,065/p_1$
1.99 ~ 1.86	20	$470/p_0+1\,350/p_1$

4.4 计数调整型抽样标准与 GB2828—87

调整型抽样方案是目前使用较广泛的一种,其基本思想是在产品质量处于正常的情况下,采用一个正常抽样方案进行检验;当产品质量变坏时,采用一个加严抽样方案进行检验;当产品质量显著变好时,采用一个放宽的抽样方案进行检验.其间建立一套转移规则,按照转移规则进行抽样方案之间的调整.第二次世界大战中,美国国防部相继出版了军用标准 MIL—STD—105A,105B,105C 和 105D,1974 年国际标准化组织 ISO 采用 MIL—STD—105D 作为国际标准,代号 ISO2859.我国标准化工作者参照国际标准 ISO2859,制定了我国的抽样标准,代号为 GB2828—87.MIL—STD—105D 侧重保护定货方,而 GB2828 则兼顾对供货方与定货方的保护,GB2828 适用于计数抽样连续批的逐批检查,它是以合格质量水平为质量指标的抽样标准,主要由三个部分组成:样本量字码表(表 4-5);抽样主表(表 4-6 为一次正常检查抽样方案,表4-7为一次加严检查抽样方案,表4-8为一次放宽检查抽样方案);转移规则与判断规则.

使用 GB2828 确定抽样方案时,必须具备如下条件:

(1) 规定批量 N;

(2) 规定合格质量水平 AQL;

(3) 规定检查水平 IL;

(4) 规定检查的严格度与转移规则;

(5) 选择抽样类型.

表 4-5

批量范围	特殊检查水平				一般检查水平		
	S-1	S-2	S-3	S-4	Ⅰ	Ⅱ	Ⅲ
1 ~ 8	A	A	A	A	A	A	B
9 ~ 15	A	A	A	A	A	B	C
16 ~ 25	A	A	B	B	B	C	D
26 ~ 50	A	B	B	C	C	D	E
51 ~ 90	B	B	C	C	C	E	F
91 ~ 150	B	B	C	D	D	F	G
151 ~ 280	B	C	D	E	E	G	H
281 ~ 500	B	C	D	E	F	H	J
501 ~ 1 200	C	C	E	F	G	J	K
1 201 ~ 3 200	C	D	E	G	H	K	L
3 201 ~ 10 000	C	D	F	G	J	L	M
10 001 ~ 35 000	C	D	F	H	K	M	N
35 001 ~ 150 000	D	E	G	J	L	N	P
150 001 ~ 500 000	D	E	G	J	M	P	Q
≥ 500 001	D	E	H	K	N	Q	R

表 4-6

样本量字码	样本量	合格质量水平									
		0.010	0.015	0.025	0.040	0.065	0.10	0.15	0.25	0.40	0.65
		Ac Re	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*
A	2	│	│	│	│	│	│	│	│	│	│
B	3	│	│	│	│	│	│	│	│	│	│
C	5	│	│	│	│	│	│	│	│	│	│
D	8	│	│	│	│	│	│	│	│	│	│
E	13	│	│	│	│	│	│	│	│	│	↓
F	20	│	│	│	│	│	│	│	│	↓	0 1
G	32	│	│	│	│	│	│	│	↓	0 1	↑
H	50	│	│	│	│	│	│	↓	0 1	↑	↓
J	80	│	│	│	│	│	↓	0 1	↑	↓	1 2
K	125	│	│	│	│	↓	0 1	↑	↓	1 2	2 3
L	200	│	│	│	↓	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4
M	315	│	│	↓	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4	5 6
N	500	│	↓	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8
P	800	↓	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11
Q	1 250	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	14 15
R	2 000	↑	│	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	14 15	21 22

续表

样本量字码	样本量	合格质量水平						AQL			
		1.0	1.5	2.5	4.0	6.5	10	15	25	40	…
		Ac Re	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	…
A	2	|	|	|	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3	
B	3	|	|	↓	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4	
C	5	|	↓	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	
D	8	↓	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	
E	13	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	
F	20	↑	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	14 15	
G	32	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	14 15	21 22	
H	50	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	14 15	21 22	↑	
J	80	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	14 15	21 22	↑	|	
K	125	3 4	5 6	7 8	10 11	14 15	21 22	↑	|	|	
L	200	5 6	7 8	10 11	14 15	21 22	↑	|	|	|	
M	315	7 8	10 11	14 15	21 22	↑	|	|	|	|	
N	500	10 11	14 15	21 22	↑	|	|	|	|	|	
P	800	14 15	21 22	↑	|	|	|	|	|	|	
Q	1 250	21 22	↑	|	|	|	|	|	|	|	
R	2 000	↑	|	|	|	|	|	|	|	|	

↓ 表示用箭头下面的第一个抽样方案，如果样本量等于或超过批量，进行百分之百的检查．↑ 表示用箭头上面的第一个抽样方案．*Ac* 为合格判定数．*Re* 为不合格判定数．

表4-7

样本量字码	样本量	合格质量水平									
		0.010	0.015	0.025	0.040	0.065	0.10	0.15	0.25	0.40	0.65
		Ac Re	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*
A	2	|	|	|	|	|	|	|	|	|	|
B	3	|	|	|	|	|	|	|	|	|	|
C	5	|	|	|	|	|	|	|	|	|	|
D	8	|	|	|	|	|	|	|	|	|	|
E	13	|	|	|	|	|	|	|	|	|	|
F	20	|	|	|	|	|	|	|	|	|	↓
G	32	|	|	|	|	|	|	|	|	↓	0 1
H	50	|	|	|	|	|	|	|	↓	0 1	|
J	80	|	|	|	|	|	|	↓	0 1	|	↓
K	125	|	|	|	|	|	↓	0 1	|	↓	1 2
L	200	|	|	|	|	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3
M	315	|	|	|	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3	3 4
N	500	|	|	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3	3 4	5 6
P	800	|	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	8 9
Q	1 250	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	8 9	12 13
R	2 000	0 1	↑	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	8 9	12 13	18 19
S	3 150			1 2							

续表

样本量字码	样本量	合格质量水平						AQL			
		1.0	1.5	2.5	4.0	6.5	10	15	25	40	…
		Ac Re	Ac Re	Ac Re	Ac Re	Ac Re	Ac Re	Ac Re	Ac Re	Ac Re	…
A	2	|	|	|	|	↓	|	|	↓	1 2	
B	3	|	|	|	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3	
C	5	|	|	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3	3 4	
D	8	|	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	
E	13	↓	0 1	|	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	8 9	
F	20	0 1	|	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	8 9	12 13	
G	32	|	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	8 9	12 13	18 19	
H	50	↓	1 2	2 3	3 4	5 6	8 9	12 13	18 19	↑	
J	80	1 2	2 3	3 4	5 6	8 9	12 13	18 19	↑	|	
K	125	2 3	3 4	5 6	8 9	12 13	18 19	↑	|	|	
L	200	3 4	5 6	8 9	12 13	18 19	↑	|	|	|	
M	315	5 6	8 9	12 13	18 19	↑	|	|	|	|	
N	500	8 9	12 13	18 19	↑	|	|	|	|	|	
P	800	12 13	18 19	↑	|	|	|	|	|	|	
Q	1 250	18 19	↑	|	|	|	|	|	|	|	
R	2 000	↑	|	|	|	|	|	|	|	|	

↓ 表示用箭头下面的第一个抽样方案，如果样本量等于或超过批量，进行百分之百的检查．↑ 表示用箭头上面的第一个抽样方案．*Ac* 为合格判定数．*Re* 为不合格判定数．

表 4-8

样本量字码	样本量	合格质量水平									
		0.010	0.015	0.025	0.040	0.065	0.10	0.15	0.25	0.40	0.65
		Ac Re	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*
A	2	│	│	│	│	│	│	│	│	│	│
B	2	│	│	│	│	│	│	│	│	│	│
C	2	│	│	│	│	│	│	│	│	│	│
D	3	│	│	│	│	│	│	│	│	│	│
E	5	│	│	│	│	│	│	│	│	│	↓
F	8	│	│	│	│	│	│	│	│	↓	0 1
G	13	│	│	│	│	│	│	│	↓	0 1	↑
H	20	│	│	│	│	│	│	↓	0 1	↑	↓
J	32	│	│	│	│	│	↓	0 1	↑	↓	0 1
K	50	│	│	│	│	↓	0 1	↑	↓	0 1	1 2
L	80	│	│	│	↓	0 1	↑	↓	0 1	1 2	1 2
M	125	│	│	↓	0 1	↑	↓	0 1	1 2	1 2	2 3
N	200	│	↓	0 1	↑	↓	0 1	1 2	1 2	2 3	3 4
P	315	↓	0 1	↑	↓	0 1	1 2	1 2	2 3	3 4	5 6
Q	500	0 1	↑	↓	0 1	1 2	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8
R	800	↑	│	0 1	1 2	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11

续表

样本量字码	样本量	合格质量水平						AQL			
		1.0	1.5	2.5	4.0	6.5	10	15	25	40	…
		Ac Re	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	*Ac Re*	…
A	2				↓	0 1		↓	1 2	2 3	
B	2			↓	0 1	↑	↓	1 2	1 2	2 3	
C	2		↓	0 1	↑	↓	0 1	1 2	1 2	2 3	
D	3	↓	0 1	↑	↓	0 1	1 2	1 2	2 3	3 4	
E	5	0 1	↑	↓	0 1	1 2	1 2	2 3	3 4	5 6	
F	8	↑	↓	0 1	1 2	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	
G	13	↓	0 1	1 2	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	
H	20	0 1	1 2	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	↑	
J	32	1 2	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	↑		
K	50	1 2	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	↑			
L	80	2 3	3 4	5 6	7 8	10 11	↑				
M	125	3 4	5 6	7 8	10 11	↑					
N	200	5 6	7 8	10 11	↑						
P	315	7 8	10 11	↑							
Q	500	10 11	↑								
R	800	↑									

↓ 表示用箭头下面的第一个抽样方案，如果样本量等于或超过批量，进行百分之百的检查．↑ 表示用箭头上面的第一个抽样方案．*Ac* 为合格判定数．*Re* 为不合格判定数．

4.4.1 合格质量水平 AQL

合格质量水平 AQL是指在抽样检验中,认为可以接受的、连续提交检查批的过程平均上限值.AQL是一个质量界限,如能以某种方式精确地知道提交检验批的质量,则当此值低于AQL时就接收此产品,高于AQL时就拒收此产品.确定AQL值时,应由供货方与定货方通过协商来确定.

GB2828将单位产品上的不合格分为三类:A类、B类和C类.

A类不合格是指单位产品的质量特性极严重不符合规定或极重要的质量特性不符合规定.B类不合格是指单位产品的质量特性严重不符合规定或重要的质量特性不符合规定.C类不合格是指单位产品的质量特性轻微不符合规定或一般的质量特性不符合规定.对于单位产品上的不合格,可以根据不同的方式规定AQL值.原则上按不合格的分类分别规定AQL值,可以考虑在同一类不合格中对部分或单个不合格再规定AQL值,也可以考虑在不同类不合格之间再规定AQL值.具体如下:

(1)AQL(A类) < AQL(B类) < AQL(C类);

(2)AQL(重要检验) < AQL(次要检验);

(3)AQL(电气性能) < AQL(机械性能) < AQL(外观质量);

(4)AQL(检验项目少) < AQL(检验项目多).

GB2828的表4-6~表4-8给出的AQL值是按照公比为$10^{1/5}=1.585$的近似等比数列排出的,称为优先值系列或R_5系列.$AQL \leq 10$,表示每百单位产品中的不合格品数或不合格数;而$AQL > 10$,仅表示每百单位产品中的不合格数.

确定AQL值的具体方法有:(1)经验数据法;(2)使用传统的考核指标来推算AQL值;(3)概率方法;(4)损益平衡点法等,可参见文献[1,2].

4.4.2 检查水平 IL

批量与样本量之间的等级对应关系,称为**检查水平**(记为IL).表4-5给出了三个一般检查水平Ⅰ,Ⅱ,Ⅲ以及四个特殊检查水平S-1,S-2,S-3,S-4.一般检查水平Ⅰ比Ⅱ松,Ⅲ比Ⅱ严.通常采用一般检查水平Ⅱ,当需要提高对批质量的判别能力时,应采用一般检查水平Ⅲ.原则上按不合格的分类分别规定检查水平,但应注意检查水平与合格质量水平之间的协调一致性.

4.4.3 检查的严格度与转移规则

检查的严格度是指对提交批进行检查的宽严程度,通常有正常检查、加严检查和放宽检查三种不同的严格度.

(1) 正常 → 加严　如果在连续不超过五批中有两批经初次检查不合格,则从下一批开始转向加严检查,简称为"五~二"规则.

(2) 加严 → 正常　进行加严检查时,如果连续五批经初次检查合格,则从下一批开始转回正常检查,简称为"连五"规则.

(3) 检查的暂停与恢复　本次加严检查开始后,如果不合格批累计到五批,则暂停按本标准进行检查,简称为"累五"规则.在暂停检查后,如果供货方采取了改

进措施,使提交批达到或优于规定的质量要求,经主管质量部门同意后,可以恢复检查,一般应从加严检查开始.

(4) 放宽检查　如果产品质量指标一贯优于AQL,则可考虑放宽检查,在进行放宽检查时,如出现有一批放宽检查不合格或主管质量部门认为有必要转回正常检查,则应从下一批开始转入正常检查.

4.4.4　抽样类型的选择

在GB2828中,由于篇幅所限,仅列出一次抽样方案(表4-6～表4-8),分正常、加严与放宽检查三种.通常根据比较不同类型的对应抽样方案的管理费用和平均样本量,来决定采用一次,二次和五次抽样方案中的某一种(见文献[1,2]).

5　计量抽样检验

在规定的条件下,用测量、试验或其他方法,将单位产品的计量质量特征与其技术要求进行对比,并作出该产品合格与否判断的过程称为计量检验.按规定的抽样方案从批中随机地抽取部分单位产品进行计量检验,并作出该批接收与否判断的过程称为计量抽样检验.这时,一般都假定被检质量特征服从或近似服从正态分布,且产品的合格与否是相对于规格限(如公差)来说的.通常,规格限有上下之分,分别称为上规格限和下规格限.仅给出上(或下)规格限的情形称为**单侧规格限**;同时给出上、下规格限的情形称为**双侧规格限**.计量抽样检验的优点是比较精密,能提供比较确切的质量信息;缺点是比较烦琐.它与计数抽样检验的区别在于,前者是以样本中各单位产品的质量特征值为依据,而后者则是以样本中的不合格品(或不合格)数为依据.

在计量抽样检验中,用以衡量批质量的参数很多,常用的有均值、不合格品率和标准差等,而且其判断规则随产品质量参数的不同而各异.

5.1　以均值为质量指标的计量一次抽样检验

由于许多产品的生产过程的质量或产品批的质量是用计量质量特征 X 分布的均值 μ 来表示的,所以,对于单侧上规格限 U,由于要求 $X \leqslant U$,因而要求 μ 越小越好;对于单侧下规格限 L,则要求 μ 越大越好.设 $X \sim N(\mu,\sigma^2)$,下面分别来讨论这些情形.

5.1.1　单侧下规格限情形

设 μ_0 是预先给定的合格质量;μ_1 是预先给定的极限质量,它为小于 μ_0 的一个数值.所要建立的抽检方案是使得当 $\mu \geqslant \mu_0$ 时,以不低于 $1-\alpha$ 的概率接收该批产品;当 $\mu \leqslant \mu_1$ 时,以不超过 β 的概率接收该批产品(α,β 均为小概率),α 是生产方的风险,β 是使用方的风险.设从产品中随机抽取样本量为 n 的样本为 $x_1,x_2,\cdots,x_n$.

1. σ^2 已知

采用如下的判断规则：

$$\begin{cases}当\ \bar{x} \geqslant \lambda\ 时，接收此批；\\ 当\ \bar{x} < \lambda\ 时，拒收此批，\end{cases}$$

其中 λ 为一个待定的实数；$\bar{x}$ 为样本均值．上述判断规则由 n 和 λ 唯一决定．下面给出 n,λ 的计算方法．

为满足当 $\mu \geqslant \mu_0$ 时，以不低于 $1-\alpha$ 的概率接收，且当 $\mu \leqslant \mu_1$ 时，以不超过 β 的概率接收的规则，应有

$$\begin{cases}P\{\bar{X} \geqslant \lambda\} = 1-\alpha & (当\ \mu = \mu_0\ 时),\\ P\{\bar{X} \geqslant \lambda\} = \beta & (当\ \mu = \mu_1\ 时).\end{cases} \tag{5-1}$$

由于当 $\mu = \mu_i$ 时，

$$\frac{\sqrt{n}(\bar{X}-\mu_i)}{\sigma} \sim N(0,1) \qquad (i = 0,1),$$

故由式(5-1)，得

$$\begin{cases}1-\Phi\left(\dfrac{\sqrt{n}(\lambda-\mu_0)}{\sigma}\right) = 1-\alpha,\\ 1-\Phi\left(\dfrac{\sqrt{n}(\lambda-\mu_1)}{\sigma}\right) = \beta.\end{cases}$$

由此，可解得

$$\begin{cases}n \approx \sigma^2\left(\dfrac{\Phi^{-1}(\alpha)+\Phi^{-1}(\beta)}{\mu_1-\mu_0}\right)^2;\\ \lambda = \dfrac{\mu_1\Phi^{-1}(\alpha)+\mu_0\Phi^{-1}(\beta)}{\Phi^{-1}(\alpha)+\Phi^{-1}(\beta)},\end{cases} \tag{5-2}$$

其中 $\Phi(x)$ 为标准正态分布的分布函数；$\Phi^{-1}(x)$ 为 $\Phi(x)$ 的反函数．

所以，当 σ 已知时，以均值为质量指标，单侧下规格限的计量一次抽样方案(n,λ)可由式(5-2)确定．对于既定方案(n,λ)来说，其接收概率(OC 曲线)为

$$L(\mu) = P\{\bar{X} \geqslant \lambda\} = 1-\Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda-\mu)}{\sigma}\right).$$

2. σ^2 未知

采用如下的判断规则：

$$\begin{cases}当\ \bar{x} - ts \geqslant \mu_0\ 时，接收此批；\\ 当\ \bar{x} - ts < \mu_0\ 时，拒收此批，\end{cases}$$

其中 t 为一个待定的实数；$\bar{x} = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i/n$ 为样本均值；$s^2 = \sum\limits_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2/(n-1)$ 为样本方差．上述判断规则由 n 和 t 唯一决定．下面给出 n,t 的计算方法．

为满足当 $\mu \geqslant \mu_0$ 时，以不低于 $1-\alpha$ 的概率接收，且当 $\mu \leqslant \mu_1$ 时，以不超过 β 的概率接收的规则，应有

$$\begin{cases}P\{\bar{X} \geqslant \mu_0 + ts\} = 1-\alpha & (当\ \mu = \mu_0\ 时),\\ P\{\bar{X} \geqslant \mu_0 + ts\} = \beta & (当\ \mu = \mu_1\ 时).\end{cases} \tag{5-3}$$

即有

$$\begin{cases} P\left\{\dfrac{\sqrt{n}(\overline{X}-\mu_0)}{s} \geqslant \sqrt{n}t\right\} = 1-\alpha & (\text{当 } \mu=\mu_0 \text{ 时}), \\ P\left\{\dfrac{\sqrt{n}(\overline{X}-\mu_0)}{s} \geqslant \sqrt{n}t\right\} = \beta & (\text{当 } \mu=\mu_1 \text{ 时}). \end{cases} \tag{5-4}$$

当 $\mu=\mu_0$ 时，$\sqrt{n}(\overline{X}-\mu_0)/s$ 服从自由度为 $n-1$ 的 t 分布；而当 $\mu=\mu_1$ 时，$\sqrt{n}(\overline{X}-\mu_1)/s$ 服从自由度为 $n-1$，非中心参数为 $\sqrt{n}(\mu_1-\mu_0)/\sigma$ 的非中心 t 分布．因此，从式(5-4) 中确定 n 和 t 是非常麻烦的．下面介绍当 n 较大时，n,t 的一种近似解法，以便实际中应用．

对于固定的 t，当 n 较大且 $\mu=\mu_i$ 时，$\overline{X}-ts$ 近似地服从

$$N((\mu_i-t\sigma),(\frac{1}{n}+\frac{t^2}{2(n-1)})\sigma^2), \qquad (i=0,1).$$

这样，式(5-3) 近似地变为

$$\begin{cases} 1-\Phi\left(\dfrac{t\sigma}{\sigma\sqrt{\dfrac{1}{n}+\dfrac{t^2}{2(n-1)}}}\right) = 1-\alpha, \\ \Phi\left(\dfrac{\mu_0-\mu_1+t\sigma}{\sigma\sqrt{\dfrac{1}{n}+\dfrac{t^2}{2(n-1)}}}\right) = 1-\beta. \end{cases}$$

即有

$$\begin{cases} \dfrac{t}{\sqrt{\dfrac{1}{n}+\dfrac{t^2}{2(n-1)}}} = \Phi^{-1}(\alpha), \\ \dfrac{\mu_0-\mu_1+t\sigma}{\sigma\sqrt{\dfrac{1}{n}+\dfrac{t^2}{2(n-1)}}} = -\Phi^{-1}(\beta). \end{cases} \tag{5-5}$$

利用当 n 较大时，$(n+1)/n \approx 1$，解方程式(5-5)，近似得到

$$\begin{cases} n = \sigma^2\left(\dfrac{\Phi^{-1}(\alpha)+\Phi^{-1}(\beta)}{\mu_1-\mu_0}\right)^2 + \dfrac{(\Phi^{-1}(\alpha))^2}{2}, \\ t = \dfrac{(\mu_1-\mu_0)\Phi^{-1}(\alpha)}{\sigma(\Phi^{-1}(\alpha)+\Phi^{-1}(\beta))}. \end{cases} \tag{5-6}$$

所以，当 σ^2 未知时，以均值为质量指标，单侧下规格限的计量一次抽样方案 (n,t) 可由式(5-6) 确定．对既定方案 (n,t) 来说，其接收概率(OC 曲线) 为

$$\begin{aligned} L(\mu) &= P\{\overline{X} \geqslant \mu_0+ts\} = 1-P\{\overline{X}-ts<\mu_0\} \\ &= 1-\Phi\left(\dfrac{\mu_0-\mu+t\sigma}{\sigma\sqrt{\dfrac{1}{n}+\dfrac{t^2}{2(n-1)}}}\right). \end{aligned} \tag{5-7}$$

需要指出，式(5-6)、式(5-7) 两式中的未知参数 σ，只能根据历史资料给出估计值；判断规则中的样本标准差 s 的值时，应由正在检验的当批产品的样本值计算．

5.1.2 单侧上规格限情形

设 μ_0 是预先给定的合格质量，μ_1 是预先给定的极限质量，它为大于 μ_0 的一个数值．所要建立的抽检方案是使得当 $\mu \leqslant \mu_0$ 时，以不低于 $1-\alpha$ 的概率接收该批产品；当 $\mu > \mu_1$ 时，以不超过 β 的概率接收该批产品（α,β 为小概率），α 是生产方的风险；β 是使用方的风险．设从产品中随机抽取样本量为 n 的样本为 $x_1,x_2,\cdots,x_n$．

1. σ^2 已知

采用如下的判断规则：

$$\begin{cases}\text{当 } \bar{x} \leqslant \lambda \text{ 时，接收此批；}\\ \text{当 } \bar{x} > \lambda \text{ 时，拒收此批，}\end{cases}$$

其中 λ 为一个待定的实数；$\bar{x}$ 为样本均值．上述判断规则由 n 和 λ 唯一决定．下面给出 n、λ 的计算方法．

为满足当 $\mu \leqslant \mu_0$ 时，以不低于 $1-\alpha$ 的概率接收，且当 $\mu \geqslant \mu_1$ 时，以不超过 β 的概率接收的规则，则应有

$$\begin{cases}P\{\bar{X} \leqslant \lambda\} = 1-\alpha & (\text{当 } \mu = \mu_0 \text{ 时}),\\ P\{\bar{X} \leqslant \lambda\} = \beta & (\text{当 } \mu = \mu_1 \text{ 时}).\end{cases} \tag{5-8}$$

由于当 $\mu = \mu_i$ 时，

$$\sqrt{n}(\bar{X}-\mu_i)/\sigma \sim N(0,1) \qquad (i=0,1),$$

故由式(5-8)，得

$$\begin{cases}\Phi\left(\dfrac{\sqrt{n}(\lambda-\mu_0)}{\sigma}\right) = 1-\alpha,\\ \Phi\left(\dfrac{\sqrt{n}(\lambda-\mu_1)}{\sigma}\right) = \beta.\end{cases}$$

由此，可解得

$$\begin{cases}n \approx \sigma^2\left(\dfrac{\Phi^{-1}(\alpha)+\Phi^{-1}(\beta)}{\mu_1-\mu_0}\right)^2,\\ \lambda = \dfrac{\mu_1\Phi^{-1}(\alpha)+\mu_0\Phi^{-1}(\beta)}{\Phi^{-1}(\alpha)+\Phi^{-1}(\beta)}.\end{cases} \tag{5-9}$$

所以，当 σ 已知时，以均值为质量指标，单侧上规格限的计量一次抽样方案 (n,λ) 可由式(5-9)确定．对于既定方案 (n,λ) 来说，其接收概率（OC 曲线）为

$$L(\mu) = P\{\bar{X} \leqslant \lambda\} = \Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda-\mu)}{\sigma}\right).$$

不难发现，式(5-2)与式(5-9)完全相同．但应注意，在式(5-2)中，$\mu_1 < \mu_0$ 且 $\mu_1 < \lambda < \mu_0$；而在式(5-9)中，$\mu_1 > \mu_0$ 且 $\mu_0 < \lambda < \mu_1$．

2. σ^2 未知

采用如下的判断规则：

$$\begin{cases}\text{当 } \bar{x} - ts \leqslant \mu_0 \text{ 时，接收此批；}\\ \text{当 } \bar{x} - ts > \mu_0 \text{ 时，拒收此批，}\end{cases}$$

其中 t 为一个待定的实数．上述判断规则由 n 和 t 唯一决定．下面给出 n,t 的计算方法．

为满足当 $\mu \leqslant \mu_0$ 时，以不低于 $1-\alpha$ 的概率接收，且当 $\mu \geqslant \mu_1$ 时，以不超过 β 的概率接收的规则，应有

$$\begin{cases} P\{\bar{X} \leqslant \mu_0 + ts\} = 1-\alpha & (\text{当 } \mu = \mu_0 \text{ 时}), \\ P\{\bar{X} \leqslant \mu_0 + ts\} = \beta & (\text{当 } \mu = \mu_1 \text{ 时}). \end{cases} \tag{5-10}$$

即有

$$\begin{cases} P\left\{\dfrac{\sqrt{n}(\bar{X}-\mu_0)}{s} \leqslant \sqrt{n}t\right\} = 1-\alpha & (\text{当 } \mu = \mu_0 \text{ 时}), \\ P\left\{\dfrac{\sqrt{n}(\bar{X}-\mu_0)}{s} \leqslant \sqrt{n}t\right\} = \beta & (\text{当 } \mu = \mu_1 \text{ 时}). \end{cases} \tag{5-11}$$

同样，由于从式(5-11)中确定 n 和 t 是非常麻烦的．下面介绍当 n 较大时，n，t 的一种近似解法，以便实际中应用．

对于固定的 t，当 n 较大且 $\mu = \mu_i$ 时，$\bar{X} - ts$ 近似地服从 $N(\mu_i - t\sigma, [1/n + t^2/(2(n-1))]\sigma^2)$，$i = 0,1$．这样，式(5-10)近似地变为

$$\begin{cases} \Phi\left(\dfrac{t\sigma}{\sigma\sqrt{\dfrac{1}{n} + \dfrac{t^2}{2(n-1)}}}\right) = 1-\alpha, \\ \Phi\left(\dfrac{\mu_0 - \mu_1 + t\sigma}{\sigma\sqrt{\dfrac{1}{n} + \dfrac{t^2}{2(n-1)}}}\right) = \beta. \end{cases}$$

即有

$$\begin{cases} \dfrac{t}{\sqrt{\dfrac{1}{n} + \dfrac{t^2}{2(n-1)}}} = \Phi^{-1}(1-\alpha) = -\Phi^{-1}(\alpha), \\ \dfrac{\mu_0 - \mu_1 + t\sigma}{\sigma\sqrt{\dfrac{1}{n} + \dfrac{t^2}{2(n-1)}}} = \Phi^{-1}(\beta). \end{cases} \tag{5-12}$$

利用当 n 较大时，$(n+1)/n \approx 1$，解方程式(5-12)，近似得到

$$\begin{cases} n = \sigma^2\left(\dfrac{\Phi^{-1}(\alpha) + \Phi^{-1}(\beta)}{\mu_1 - \mu_0}\right)^2 + \dfrac{(\Phi^{-1}(\alpha))^2}{2}, \\ t = \dfrac{(\mu_1 - \mu_0)\Phi^{-1}(\alpha)}{\sigma[\Phi^{-1}(\alpha) + \Phi^{-1}(\beta)]}. \end{cases} \tag{5-13}$$

所以，当 σ^2 未知时，以均值为质量指标，单侧上规格限的计量一次抽样方案 (n,t) 可由式(5-13)确定．对既定方案 (n,t) 来说，其接收概率(OC曲线)为

$$L(\mu) = P\{\bar{X} \leqslant \mu_0 + ts\} = \Phi\left(\dfrac{\mu_0 - \mu_1 + t\sigma}{\sigma\sqrt{\dfrac{1}{n} + \dfrac{t^2}{2(n-1)}}}\right). \tag{5-14}$$

同样需要指出，式(5-13)，式(5-14) 两式中的未知参数 σ，只能根据历史资料给出估计值；判断规则中的样本标准差 s 的值，应由正在检验的当批产品的样本值计算．

5.1.3 双侧规格限情形

设方差 σ^2 已知，可以认为：当 $\mu_0 \leqslant \mu \leqslant \mu_0^*$ 时，产品质量是合格的；当 $\mu > \mu_1$ 或 $\mu > \mu_1^*$ 时，产品质量是不合格的．其中 $\mu_0, \mu_0^*, \mu_1, \mu_1^*$ 皆为已知，且满足 $\mu_1 < \mu_0 < \mu_0^* < \mu_1^*$，$\mu_0 - \mu_1 = \mu_1^* - \mu_0^*$．$\mu_0$ 和 μ_0^* 分别称为合格质量的下限与上限，μ_1 和 μ_1^* 分别称为极限质量的下限与上限．所要建立的抽检方案是使得当 $\mu = \mu_0$ 或 $\mu = \mu_0^*$ 时，以 $1-\alpha$ 的概率接收该批产品；当 $\mu = \mu_1$ 或 $\mu = \mu_1^*$ 时，以 β 的概率接收该批产品(α, β 均为小概率)，α 是生产方的风险，β 是使用方的风险．设从产品中随机抽取样本量为 n 的样本为 $x_1, x_2, \cdots, x_n$．采用如下的判断规则：

$$\begin{cases} \text{当 } \lambda_1 \leqslant \bar{x} \leqslant \lambda_2 \text{ 时，接收此批；} \\ \text{当 } \bar{x} < \lambda_1 \text{ 或 } \bar{x} > \lambda_2 \text{ 时，拒收此批，} \end{cases}$$

其中 $n, \lambda_1, \lambda_2 (\lambda_1 \leqslant \lambda_2)$ 为待定的实数；$\bar{x}$ 为样本均值．上述判断规则由 n 和 λ 唯一决定．下面给出 n, λ_1, λ_2 的计算方法．

为满足当 $\mu = \mu_0$ 或 $\mu = \mu_0^*$ 时，以 $1-\alpha$ 的概率接收，且当 $\mu = \mu_1$ 或 $\mu = \mu_1^*$ 时，以 β 的概率接收的规则，应有

$$\begin{cases} P\{\lambda_1 \leqslant \bar{X} \leqslant \lambda_2\} = 1 - \alpha & (\text{当 } \mu = \mu_0 \text{ 时})；\\ P\{\lambda_1 \leqslant \bar{X} \leqslant \lambda_2\} = 1 - \alpha & (\text{当 } \mu = \mu_0^* \text{ 时})；\\ P\{\lambda_1 \leqslant \bar{X} \leqslant \lambda_2\} = \beta & (\text{当 } \mu = \mu_1 \text{ 时})；\\ P\{\lambda_1 \leqslant \bar{X} \leqslant \lambda_2\} = \beta & (\text{当 } \mu = \mu_1^* \text{ 时})． \end{cases} \tag{5-15}$$

由于当 $\mu = \mu_i$ 时，$\sqrt{n}(\bar{X} - \mu_i)/\sigma \sim N(0,1)$；当 $\mu = \mu_i^*$ 时，$\sqrt{n}(\bar{X} - \mu_i^*)/\sigma \sim N(0,1)$，$i = 0, 1$，故由式(5-15)，得

当 $\mu = \mu_0$ 时，

$$\Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_2 - \mu_0)}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_1 - \mu_0)}{\sigma}\right) = 1 - \alpha;$$

当 $\mu = \mu_0^*$ 时，

$$\Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_2 - \mu_0^*)}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_1 - \mu_0^*)}{\sigma}\right) = 1 - \alpha;$$

当 $\mu = \mu_1$ 时，

$$\Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_2 - \mu_1)}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_1 - \mu_1)}{\sigma}\right) = \beta;$$

当 $\mu = \mu_1^*$ 时，

$$\Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_2 - \mu_1^*)}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_1 - \mu_1^*)}{\sigma}\right) = \beta.$$

由此，可得 $$\lambda_2 - \mu_0 = -(\lambda_1 - \mu_0^*), \quad \lambda_2 - \mu_1 = -(\lambda_1 - \mu_1^*), \tag{5-16}$$

$$\begin{cases}\Phi\left(\dfrac{\sqrt{n}(\lambda_1-\mu_0)}{\sigma}\right)+\Phi\left(\dfrac{\sqrt{n}(\lambda_1-\mu_0^*)}{\sigma}\right)=\alpha;\\ \Phi\left(\dfrac{\sqrt{n}(\lambda_1-\mu_1)}{\sigma}\right)+\Phi\left(\dfrac{\sqrt{n}(\lambda_1-\mu_1^*)}{\sigma}\right)=1-\beta.\end{cases}\tag{5-17}$$

由式(5-17)可解出 n 和 λ_1，再代入式(5-16)可得 λ_2. 令

$$\alpha_1=1-\Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_2-\mu_0)}{\sigma}\right),\quad \beta_1=1-\Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_2-\mu_1)}{\sigma}\right).$$

则有

$$\begin{cases}n=\left(\dfrac{\Phi^{-1}(\alpha-\alpha_1)+\Phi^{-1}(\beta+\beta_1)}{\mu_1-\mu_0}\sigma\right)^2;\\ \lambda_1=\dfrac{\mu_1\Phi^{-1}(\alpha-\alpha_1)+\mu_0\Phi^{-1}(\beta+\beta_1)}{\Phi^{-1}(\alpha-\alpha_1)+\Phi^{-1}(\beta+\beta_1)};\\ \lambda_2=\dfrac{\mu_1^*\Phi^{-1}(\alpha-\alpha_1)+\mu_0^*\Phi^{-1}(\beta+\beta_1)}{\Phi^{-1}(\alpha-\alpha_1)+\Phi^{-1}(\beta+\beta_1)}=\mu_0+\mu_0^*-\lambda_1.\end{cases}\tag{5-18}$$

所以，当 σ 已知时，以均值为质量指标，双侧规格限的计量一次抽样方案(n,λ_1,λ_2)可由式(5-18)确定．只要算出 $\Phi^{-1}(\alpha-\alpha_1)$ 和 $\Phi^{-1}(\beta+\beta_1)$ 即可．表5-1给出了 $\alpha=0.05$ 时，$\Phi^{-1}(\alpha-\alpha_1)$ 的数值；表5-2给出了 $\beta=0.10$ 时，$\Phi^{-1}(\beta+\beta_1)$ 的数值．

表 5-1

$\dfrac{\mu_0^*-\mu_0}{\sigma/\sqrt{n}}$	$-\Phi^{-1}(\alpha-\alpha_1)$	$\dfrac{\mu_0^*-\mu_0}{\sigma/\sqrt{n}}$	$-\Phi^{-1}(\alpha-\alpha_1)$
2.782	1.6449	0.428	1.790
2.316	1.6452	0.395	1.800
2.175	1.6455	0.364	1.810
1.867	1.647	0.334	1.820
1.686	1.649	0.305	1.830
1.529	1.652	0.277	1.840
1.299	1.660	0.251	1.850
1.132	1.670	0.225	1.860
1.015	1.680	0.199	1.870
0.923	1.690	0.175	1.880
0.847	1.700	0.151	1.890
0.781	1.710	0.129	1.900
0.723	1.720	0.105	1.910
0.671	1.730	0.083	1.920
0.623	1.740	0.062	1.930
0.579	1.750	0.041	1.940
0.538	1.760	0.020	1.950
0.499	1.770	0.010	1.955
0.463	1.780	0.000	1.960

注：$\alpha=0.05$.

表 5-2

$\frac{\mu_1^* - \mu_1}{\sigma/\sqrt{n}}$	5.5686	5.3225	5.2019	5.1204
$\Phi^{-1}(\beta+\beta_1)$	−1.2815	−1.2814	−1.2813	−1.2812

注：$\beta = 0.10$.

对既定方案(n,λ_1,λ_2)来说，其接收概率(OC 曲线)为

$$L(\mu) = P\{\lambda_1 \leqslant \bar{X} \leqslant \lambda_2\} = \Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_2-\mu)}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda_1-\mu)}{\sigma}\right).$$

5.2 以不合格品率为质量指标的计量一次抽样检验

设产品的质量特征 $X \sim N(\mu,\sigma^2)$，下面分情形来讨论．

5.2.1 单侧下规格限情形

若规定单位产品质量特征值的下限为 L，则当单位产品的特征值 $X \geqslant L$ 时，认为是合格品；否则为不合格品．那么产品的不合格品率 p 就是“$X < L$”的概率，即

$$p = P\{X < L\} = \Phi\left(\frac{L-\mu}{\sigma}\right),$$

由上式可得

$$\mu = L - \sigma\Phi^{-1}(p).$$

1. 已知方差 σ^2

由于 L 与 σ 皆已知，而且 p 随着 μ 的减小而增加，若规定 p_0 为合格质量，p_1 为极限质量，则有

$$p \leqslant p_0 \Leftrightarrow \mu \geqslant \mu_0; \quad p \geqslant p_1 \Leftrightarrow \mu \leqslant \mu_1,$$

其中 $p_0 < p_1$，且

$$\mu_0 = L - \sigma\Phi^{-1}(p_0), \quad \mu_1 = L - \sigma\Phi^{-1}(p_1). \tag{5-19}$$

所建立的抽样方案，是使得

$$\begin{cases} \text{当 } p \leqslant p_0 \text{ 时，以不低于 } 1-\alpha \text{ 的概率接收；} \\ \text{当 } p \geqslant p_1 \text{ 时，以不超过 } \beta \text{ 的概率接收．} \end{cases}$$

这等价于：

$$\begin{cases} \text{当 } \mu \leqslant \mu_0 \text{ 时，以不低于 } 1-\alpha \text{ 的概率接收；} \\ \text{当 } \mu \geqslant \mu_1 \text{ 时，以不超过 } \beta \text{ 的概率接收．} \end{cases}$$

这样单侧下规格限的计量一次抽样方案就可以转化为以均值为质量指标的单侧下规格限的计量一次抽样方案．将式(5-19)代人式(5-20)，得

$$\begin{cases} n = \left(\dfrac{\Phi^{-1}(\alpha) + \Phi^{-1}(\beta)}{\Phi^{-1}(p_1) - \Phi^{-1}(p_0)}\right)^2, \\ \lambda = L - \dfrac{\Phi^{-1}(\alpha)\Phi^{-1}(p_1) + \Phi^{-1}(\beta)\Phi^{-1}(p_0)}{\Phi^{-1}(\alpha) + \Phi^{-1}(\beta)}\sigma. \end{cases} \tag{5-20}$$

其判断规则为

$$\begin{cases}\text{当 } \bar{x} \geqslant \lambda \text{ 时,接收此批;} \\ \text{当 } \bar{x} < \lambda \text{ 时,拒收此批.}\end{cases}$$

在既定的抽样方案(n,λ)下,其接收概率(OC 曲线)为

$$L(p) = P\{\bar{X} \geqslant \lambda\} = 1 - \Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda - \mu)}{\sigma}\right)$$

$$= 1 - \Phi\left(\frac{\lambda - L + \sigma\Phi^{-1}(p)}{\sigma/\sqrt{n}}\right). \tag{5-21}$$

可见,接收概率的大小取决于不合格品率 p 的值,p 越小,则 $L(p)$ 就越大.

2. 未知方差 σ^2

设产品批中随机地抽取样本量为 n 的子样本 $x_1, x_2, \cdots, x_n$,采取如下判断规则:

$$\begin{cases}\text{当 } \bar{x} - ts \geqslant L \text{ 时,接收此批;} \\ \text{当 } \bar{x} - ts < L \text{ 时,拒收此批,}\end{cases}$$

其中 $\bar{x}$ 为样本均值;s 为样本标准差;t 为待定实数.下面介绍如何确定 n 和 t.

由于所确定的抽样方案需满足:当 $p \leqslant p_0$ 时,以不低于 $1-\alpha$ 的概率接收;当 $p \geqslant p_1$ 时,以不超过 β 的概率接收,故应有

$$\begin{cases}P\{\bar{X} - ts \geqslant L\} = 1 - \alpha & (\text{当 } p = p_0 \text{ 时}); \\ P\{\dot{X} - ts \geqslant L\} = \beta & (\text{当 } p = p_1 \text{ 时}).\end{cases} \tag{5-22}$$

当 n 比较大时,$\bar{X} - ts$ 近似服从期望为 $E(\bar{X} - ts) \approx \mu - t\sigma$;方差为 $\mathrm{var}(\bar{X} - ts) = \sigma^2\left(\frac{1}{n} + \frac{t^2}{2(n-1)}\right)$ 的正态分布,并利用 $\mu = L - \sigma\Phi^{-1}(p)$,可得

$$P\{\bar{X} - ts \geqslant L\} = 1 - \Phi\left(\frac{t - \Phi^{-1}(p) + t}{\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{t^2}{2(n-1)}}}\right). \tag{5-23}$$

于是由式(5-22),有

$$\begin{cases}\dfrac{\Phi^{-1}(p_0) + t}{\frac{1}{n} + \frac{t^2}{2(n-1)}} = \Phi^{-1}(\alpha) & (\text{当 } p = p_0 \text{ 时}), \\ \dfrac{\Phi^{-1}(p_1) + t}{\frac{1}{n} + \frac{t^2}{2(n-1)}} = \Phi^{-1}(1-\beta) = -\Phi^{-1}(\beta) & (\text{当 } p = p_1 \text{ 时}).\end{cases}$$

由上式可解出 t,得

$$t = -\frac{\Phi^{-1}(\alpha)\Phi^{-1}(p_1) + \Phi^{-1}(\beta)\Phi^{-1}(p_0)}{\Phi^{-1}(\alpha) + \Phi^{-1}(\beta)}. \tag{5-24}$$

当 n 较大时,$1/(n-1) \approx 1/n$,从而可解出

$$n = \left(\frac{\Phi^{-1}(\alpha) + \Phi^{-1}(\beta)}{\Phi^{-1}(p_1) - \Phi^{-1}(p_0)}\right)^2\left(1 + \frac{t^2}{2}\right). \tag{5-25}$$

于是单侧下规格限的计量一次抽样方案(n,t)由式(5-24)、式(5-25)来确定.其接

收概率为

$$L(p)=P\{\overline{X}-ts\geqslant L\}=1-\Phi\left(\frac{\Phi^{-1}(p)+t}{\sqrt{\frac{1}{n}+\frac{t^2}{2(n-1)}}}\right).$$

由此可见,接收概率的大小取决于不合格品率 p 的大小,p 值越小,则 $L(p)$ 越大.

5.2.2　单侧上规格限情形

若规定单位产品质量特征值的上限为 U,则当单位产品的特征值 $X\leqslant U$ 时,认为是合格品;否则为不合格品.那么产品的不合格品率 p 就是"$X>U$"的概率,即

$$p=P\{X>U\}=1-\Phi\left(\frac{U-\mu}{\sigma}\right),$$

由上式可得

$$\mu=U+\sigma\Phi^{-1}(p).$$

1. 已知方差 σ^2

由于 U 与 σ 皆已知,而且 p 随着 μ 的减小而减小,若规定 p_0 为合格质量,p_1 为极限质量,则有

$$p\leqslant p_0\Leftrightarrow\mu\leqslant\mu_0;$$
$$p\geqslant p_1\Leftrightarrow\mu\geqslant\mu_1,$$

其中 $p_0<p_1$,且

$$\mu_0=U+\sigma\Phi^{-1}(p_0),$$
$$\mu_1=U+\sigma\Phi^{-1}(p_1).\tag{5-26}$$

所建立的抽样方案是,使得

$$\begin{cases}\text{当 } p\leqslant p_0 \text{ 时,以不低于 } 1-\alpha \text{ 的概率接收;}\\ \text{当 } p\geqslant p_1 \text{ 时,以不超过 } \beta \text{ 的概率接收.}\end{cases}$$

这等价于:

$$\begin{cases}\text{当 } \mu\leqslant\mu_0 \text{ 时,以不低于 } 1-\alpha \text{ 的概率接收;}\\ \text{当 } \mu\geqslant\mu_1 \text{ 时,以不超过 } \beta \text{ 的概率接收.}\end{cases}$$

这样单侧上规格限的计量一次抽样方案就可以转化为以均值为质量指标的单侧上规格限的计量一次抽样方案.将式(5-26)代入式(5-10),得

$$\begin{cases}n=\left(\dfrac{\Phi^{-1}(\alpha)+\Phi^{-1}(\beta)}{\Phi^{-1}(p_1)-\Phi^{-1}(p_0)}\right)^2,\\ \lambda=U+\dfrac{\Phi^{-1}(\alpha)\Phi^{-1}(p_1)+\Phi^{-1}(\beta)\Phi^{-1}(p_0)}{\Phi^{-1}(\alpha)+\Phi^{-1}(\beta)}\sigma.\end{cases}\tag{5-27}$$

其判断规则为

$$\begin{cases}\text{当 } \bar{x}\leqslant\lambda \text{ 时,接收此批;}\\ \text{当 } \bar{x}>\lambda \text{ 时,拒收此批.}\end{cases}$$

在既定的抽样方案(n,λ)下,其接收概率(OC 曲线)为

$$L(p)=P\{\overline{X}\leqslant\lambda\}=\Phi\left(\frac{\sqrt{n}(\lambda-\mu)}{\sigma}\right)=\Phi\left(\frac{\lambda-U-\sigma\Phi^{-1}(p)}{\sigma/\sqrt{n}}\right).$$

可见,接收概率的大小取决于不合格品率 p 的值,p 越小,则 $L(p)$ 就越大.

2. 未知方差 σ^2

采取如下判断规则:

$$\begin{cases}当\ \bar{x} - ts \leqslant U\ 时,接收此批;\\ 当\ \bar{x} - ts > U\ 时,拒收此批.\end{cases}$$

下面介绍如何确定 n 和 t.

由于所确定的抽样方案需满足:当 $p \leqslant p_0$ 时,以不低于 $1-\alpha$ 的概率接收,当 $p \geqslant p_1$ 时,以不超过 β 的概率接收,故应有

$$\begin{cases}P\{\bar{X} - ts \leqslant U\} = 1 - \alpha & (当\ p = p_0\ 时);\\ P\{\bar{X} - ts \leqslant U\} = \beta & (当\ p = p_1\ 时).\end{cases} \tag{5-28}$$

当 n 比较大时,$\bar{X} - ts$ 近似服从期望为 $E(\bar{X} - ts) \approx \mu - t\sigma$;方差为 $\mathrm{var}(\bar{X} - ts) = \sigma^2\left[\frac{1}{n} + \frac{t^2}{2(n-1)}\right]$ 的正态分布. 利用 $\mu = U + \sigma\Phi^{-1}(p)$,可得

$$P\{\bar{X} - ts \leqslant U\} = \Phi\left(\frac{\Phi^{-1}(p)}{\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{t^2}{2(n-1)}}}\right).$$

于是,由式(5-28),有

$$\begin{cases}\dfrac{t - \Phi^{-1}(p_0)}{\frac{1}{n} + \frac{t^2}{2(n-1)}} = \Phi^{-1}(1-\alpha) = -\Phi^{-1}(\alpha) & (当\ p = p_0\ 时),\\ \dfrac{t - \Phi^{-1}(p_1)}{\frac{1}{n} + \frac{t^2}{2(n-1)}} = \Phi^{-1}(\beta) & (当\ p = p_1\ 时).\end{cases}$$

由上式可解出 t,得

$$t = \frac{\Phi^{-1}(\alpha)\Phi^{-1}(p_1) + \Phi^{-1}(\beta)\Phi^{-1}(p_0)}{\Phi^{-1}(\alpha) + \Phi^{-1}(\beta)}. \tag{5-29}$$

当 n 较大时,$1/(n-1) \approx 1/n$,从而可解出

$$n = \left(\frac{\Phi^{-1}(\alpha) + \Phi^{-1}(\beta)}{\Phi^{-1}(p_1) - \Phi^{-1}(p_0)}\right)^2\left(1 + \frac{t^2}{2}\right). \tag{5-30}$$

于是,单侧上规格限的计量一次抽样方案(n,t) 由式(5-29)、式(5-30) 来确定. 其接收概率为

$$L(p) = P\{\bar{X} - ts \leqslant U\} = \Phi\left(\frac{t - \Phi^{-1}(p)}{\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{t^2}{2(n-1)}}}\right).$$

同样,接收概率的大小取决于不合格品率 p 的大小,p 值越小,则 $L(p)$ 越大.

5.3 以标准差为质量指标的计量一次抽样检验

设产品的质量特征值以其标准差为质量指标,它表示质量特征的分散程度.

一批产品的质量特征值越稳定，σ 的值就越小；σ 的值越大，说明批的质量越差．规定 σ_0 为合格质量，σ_1 为极限质量($\sigma_0 < \sigma_1$)．当一批产品的标准差 $\sigma \leqslant \sigma_0$ 时，认为此批产品合格；否则认为此批产品不合格．

若抽取了样本量为 n 的样本，则样本的标准差 s 的值不应过大，故采取如下判断规则：

$$\begin{cases} \text{当 } s^2 \leqslant \lambda \text{ 时，接收此批产品；} \\ \text{当 } s^2 > \lambda \text{ 时，拒收此批产品，} \end{cases}$$

其中 $s^2 = \dfrac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$；$\lambda$ 为待定实数．所建立的抽样方案应满足：

当 $\sigma \leqslant \sigma_0$ 时，以不低于 $1-\alpha$ 的概率接收；

当 $\sigma \geqslant \sigma_1$ 时，以不超过 β 的概率接收．

即有

$$\begin{cases} P\{s^2 \leqslant \lambda\} \geqslant 1-\alpha & (\text{当 } \sigma \leqslant \sigma_0 \text{ 时}), \\ P\{s^2 \leqslant \lambda\} \leqslant \beta & (\text{当 } \sigma \geqslant \sigma_1 \text{ 时}). \end{cases} \tag{5-31}$$

由于统计量 $(n-1)s^2/\sigma^2 \sim \chi^2(n-1)$，所以

$$P\{s^2 \leqslant \lambda\} = P\left\{\chi^2(n-1) \leqslant \frac{(n-1)\lambda}{\sigma^2}\right\}. \tag{5-32}$$

由式(5-32)可知，$P\{s^2 \leqslant \lambda\}$ 将随着 σ 的增大而减小，那么，式(5-31)变为

$$\begin{cases} P\{s^2 \leqslant \lambda\} = 1-\alpha & (\text{当 } \sigma = \sigma_0 \text{ 时}), \\ P\{s^2 \leqslant \lambda\} = \beta & (\text{当 } \sigma = \sigma_1 \text{ 时}). \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} P\left\{\chi^2(n-1) \leqslant \dfrac{(n-1)\lambda}{\sigma_0^2}\right\} = 1-\alpha & (\text{当 } \sigma = \sigma_0 \text{ 时}), \\ P\left\{\chi^2(n-1) \leqslant \dfrac{(n-1)\lambda}{\sigma_1^2}\right\} = \beta & (\text{当 } \sigma = \sigma_1 \text{ 时}). \end{cases} \tag{5-33}$$

当给定 $\sigma_0, \sigma_1, \alpha$ 和 β 时，由式(5-33)，可得

$$\frac{(n-1)\lambda}{\sigma_0^2} = \chi_\alpha^2(n-1), \quad \frac{(n-1)\lambda}{\sigma_1^2} = \chi_{1-\beta}^2(n-1).$$

从而有

$$\frac{\sigma_1^2}{\sigma_0^2} = \frac{\chi_\alpha^2(n-1)}{\chi_{1-\beta}^2(n-1)}.$$

这样利用 χ^2 分布表，对于给定的 σ_0 和 σ_1，得到计量一次抽样方案 (n, λ)．为方便起见，表 5-3 给出了 $\sigma = 0.05$、$\beta = 0.10$ 时的抽样方案，使用步骤如下：

(1) 计算 σ_1/σ_0 的值；

(2) 在表 5-3 中的 σ_1/σ_0 栏，找出与计算值 σ_1/σ_0 最接近的那个数值；

(3) 由此数值所在行向左找到样本量 n 的值；向右找到响应 λ/σ_0^2 的值，以 σ_0^2 乘以 λ/σ_0^2 之值即得 λ 值．

表 5-3

样本量 n	σ_1/σ_0	λ/σ_0^2	样本量 n	σ_1/σ_0	λ/σ_0^2
2	15.49	3.841	25	1.52	1.517
3	5.33	2.996	26	1.51	1.507
4	3.66	2.617	27	1.50	1.496
5	2.99	2.372	28	1.49	1.486
6	2.62	2.214	29	1.48	1.476
7	2.39	2.099	30	1.47	1.467
8	2.23	2.010	31	1.46	1.459
9	2.11	1.938	32	1.45	1.451
10	2.01	1.880	33	1.44	1.444
11	1.94	1.831	34	1.43	1.436
12	1.88	1.789	35	1.424	1.429
13	1.83	1.752	36	1.417	1.423
14	1.78	1.720	37	1.410	1.417
15	1.74	1.692	38	1.404	1.411
16	1.71	1.666	39	1.397	1.405
17	1.68	1.644	40	1.391	1.399
18	1.65	1.623	41	1.385	1.394
19	1.63	1.604	42	1.380	1.389
20	1.61	1.586	43	1.375	1.384
21	1.59	1.571	44	1.369	1.379
22	1.57	1.556	45	1.364	1.375
23	1.55	1.542	46	1.359	1.370
24	1.54	1.529	47	1.355	1.366

注：$\alpha = 0.05, \beta = 0.10$.

参 考 文 献

1　于善奇编著．抽样检验与质量控制．北京：北京大学出版社，1991.

2　章渭基，秦士嘉编．质量控制原理．见：现代工程数学手册编委会．现代工程数学手册第Ⅳ卷．武汉：华中工学院出版社，1987.

3　张维铭著．统计质量控制理论与应用．杭州：浙江大学出版社，1992.

4　Montgomery D C. Introduction to statistical quality control. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1991.

·随机数学卷·

第 6 篇

线性模型

编　者　王松桂
审校者　项可风

目　录

引　言

线性模型是研究客观现实世界中变量之间关系的一类很重要的统计模型．它之所以重要，是因为一方面，它包括了线性回归模型、方差分析模型和混合模型等广泛应用的实用模型；另一方面，线性模型的理论和方法是研究许多其他统计模型的基础．线性模型的基本特征是，模型的未知参数是线性的，同时又线性地包含了随机误差项．

最小二乘法是线性模型估计理论的基础．它最早见于勒让德(A.M.Legendre)和高斯(G.F.Gauss)分别于1805年和1809年出版的研究天文问题的著作中．后来，高斯、拉普拉斯(P.S.Laplace)和马尔可夫(A.A.Markov)等证明了最小二乘估计的许多重要性质．然而，费希尔(R.A.Fisher)被认为是方差分析理论与方法的奠基者．广义线性模型作为线性模型的进一步推广，它允许观测向量有更一般的均值结构和分布形式．这种模型是由那尔德(J.A.Nelder)和维德伯(R.W.M.Wedderburn)于1972年提出的，它包括了许多在生物医学和社会科学中具有广泛应用的重要模型，例如逻辑斯谛(logistic)回归模型和对数线性模型等．近20年来这种模型在理论研究和实际应用两方面都获得了长足的发展．

线性模型在自然科学、工程技术以及社会科学等领域都具有广泛的应用．

1　线性回归模型

1.1　模型概论

1.1.1　相关关系

在现实世界中，存在着大量的这样的情况：两个变量，例如 X 和 Y，彼此有一些依赖关系，由 X 可以部分地决定 Y 的值，但这种决定往往不是很准确的．常常用来说明这种依赖关系的最简单的例子是身高与体重．众所周知，一般身材比较高的人，其体重一般也倾向于比较重，但由一个人的身高并不能准确地决定他的体重．变量之间的这种依赖关系称为相关关系．线性回归模型就是研究变量之间相关关系的一种工具．

1.1.2　线性回归模型

对于上面的例子，可以把 Y 称为因变量，而把 X 称为自变量．当然在许多实际问题中，自变量不止一个，假定有 $p-1$ 个，记之为 $X_1, X_2, \cdots, X_{p-1}$．变量 Y 与

$X_1, X_2, \cdots, X_{p-1}$之间的相关关系往往可以用下面的线性关系来描述：

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \cdots + \beta_{p-1} X_{p-1} + e, \tag{1-1}$$

其中 $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_{p-1}$ 为待定的未知参数．这里，$\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \cdots + \beta_{p-1} X_{p-1}$ 表示 Y 的能够由自变量 $X_1, X_2, \cdots, X_{p-1}$ 所能确定的那一部分，而 e 表示 Y 的不能够由 $X_1, X_2, \cdots, X_{p-1}$ 所确定的那一部分，称为随机误差．式(1-1)就是刻画因变量 Y 与诸自变量 $X_1, X_2, \cdots, X_{p-1}$ 之间相关关系的数学模型，称为**线性回归模型**．

建立这个模型的方法就是通过对 $Y, X_1, X_2, \cdots, X_{p-1}$ 的一批实际观测数据来估计 $\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_{p-1}$．

假设对 $Y, X_1, X_2, \cdots, X_{p-1}$ 进行了 n 次观测，得到 n 组数据 $y_i, x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{i,p-1}, i = 1,2,\cdots,n$．它们满足式(1-1)，即它们满足如下关系式：

$$y_i = \beta_0 + x_{i1}\beta_1 + x_{i2}\beta_2 + \cdots + x_{i,p-1}\beta_{p-1} + e_i \qquad (i = 1,2,\cdots,n), \tag{1-2}$$

这里 e_i 表示第 i 次观测对应的随机误差．引进矩阵记号，令

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1,p-1} \\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2,p-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{n,p-1} \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{p-1} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix},$$

则式(1-2)具有如下简洁形式：

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{e}. \tag{1-3}$$

其中 $\boldsymbol{y}$ 为 $n \times 1$ 观测向量；$\boldsymbol{X}$ 为 $n \times p$ 已知矩阵，通常称为**设计矩阵**；$\boldsymbol{\beta}$ 为未知参数向量，一般地，称 β_0 为常数项，称 $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_{p-1}$ 为回归系数，有时候为了方便，也把 $\boldsymbol{\beta}$ 称为回归系数向量，尽管它包含了常数项 β_0；称 $\boldsymbol{e}$ 为随机误差向量．

在线性回归模型的讨论中，起着非常重要作用的是关于 $\boldsymbol{e}$ 的如下假设：

$$\begin{aligned} &1^\circ\ E(e_i) = 0 && (i = 1,2,\cdots,n); \\ &2^\circ\ \mathrm{var}(e_i) = \sigma^2 && (i = 1,2,\cdots,n); \\ &3^\circ\ \mathrm{cov}(e_i, e_j) = 0 && (i \neq j, i,j = 1,2,\cdots,n). \end{aligned} \tag{1-4}$$

假设 1° 表示所有误差项的均值为零，即 e_i 中只有随机误差而不包含系统误差．假设 2° 表示所有误差项具有相等的方差．假设 3° 则表示所有不同次的观测误差都是互不相关的．这三条假设通常称为高斯－马尔可夫假设．如果引入矩阵记号，高斯－马尔可夫假设可表示为：

$$E(\boldsymbol{e}) = 0, \quad \mathrm{cov}(\boldsymbol{e}) = \sigma^2 \boldsymbol{I}_n. \tag{1-5}$$

其中 $\boldsymbol{I}_n$ 表示 n 阶单位矩阵．将式(1-3)和式(1-5)放在一起，就构成了最基本的线性回归模型．

1.1.3 线性回归模型的应用

有了因变量和自变量的一组观测数据,应用一些统计方法就可以获得回归系数 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计,记之为 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$. 在对 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ 进行了适当的统计分析之后,将其代入式(1-1),略去误差项便得到

$$\widehat{Y}=\widehat{\beta}_0+\widehat{\beta}_1X_1+\widehat{\beta}_2X_2+\cdots+\widehat{\beta}_{p-1}X_{p-1}, \tag{1-6}$$

式(1-6)称为经验回归方程. 线性回归模型的应用在很大程度上是基于这个经验回归方程进行的. 归纳起来,其应用有如下两个方面:

1. 描述变量之间的关系

经验回归方程式(1-6)在一定程度上刻画了因变量 Y 与 $p-1$ 个自变量 $X_1,X_2,\cdots,X_{p-1}$ 之间的相关关系. 如果 $\widehat{\beta}_i>0$,则表明 Y 随着 X_i 的增加而增加,这时称 Y 与 X_i 有正相关关系;相反,如果 $\widehat{\beta}_i<0$,则表明 Y 随着 X_i 的增加而减少,这时称 Y 与 X_i 有负相关关系. 与 Y 有正相关关系的变量称为正相关变量;相反,与 Y 有负相关关系的变量称为负相关变量.

另外,回归系数 β_i 的估计值 $\widehat{\beta}_i$ 的大小在一定程度上反映了变量 X_i 对 Y 的影响程度的大小. 与其余自变量保持不变时,X_i 每增加一个单位,因变量 Y 平均"增加" $\widehat{\beta}_i$ 个单位. 据此,可以把自变量根据它们对 Y 的影响大小分为重要变量和次要变量.

2. 预测

所谓预测就是对于自变量 $X_1,X_2,\cdots,X_{p-1}$ 的一组或多组值,估计它们对应的因变量 Y 可能取的值. 这个相对说来比较简单的问题,却构成了回归模型的一个极为重要的应用.

有了经验回归方程之后,预测问题就变得很简单. 事实上,给定自变量的一组值:

$$X_1=x_1^{(0)},X_2=x_2^{(0)},\cdots,X_{p-1}=x_{p-1}^{(0)}.$$

将它们代入经验回归方程式(1-6),得到

$$\widehat{y_0}=\widehat{\beta}_0+\widehat{\beta}_1x_1^{(0)}+\widehat{\beta}_2x_2^{(0)}+\cdots+\widehat{\beta}_{p-1}x_{p-1}^{(0)},$$

$\widehat{y_0}$ 就是因变量 Y 的相应的预测值. 这里讲的是点预测. 也可以用一个区间作为相应的 Y 的预测,这叫区间预测. 详细讨论见本章 1.4 节.

1.2 最小二乘估计

1.2.1 最小二乘估计

对于线性回归模型

$$y = X\beta + e, E(e) = 0, \quad \text{cov}(e) = \sigma^2 I, \tag{1-7}$$

获得回归系数 β 的估计的最基本方法是最小二乘法．这里 y 为 $n \times 1$ 观测向量；X 为 $n \times p$ 设计矩阵；I 表示 n 阶单位矩阵．这个方法是寻找 β 使得偏差向量 $y - X\beta$ 的长度平方 $\|y - X\beta\|^2$ 达到最小．对 $\|y - X\beta\|^2$ 关于 β 求导数，并令其为零，得到

$$X^{\mathrm{T}}X\beta = X^{\mathrm{T}}y, \tag{1-8}$$

这个方程称为**正则方程**．在线性回归模型中，$n \times p$ 阶的设计矩阵 X 的秩总是等于 p，于是 $X^{\mathrm{T}}X$ 是一个可逆矩阵，因而正则方程有唯一解

$$\hat{\beta} = (X^{\mathrm{T}}X)^{-1}X^{\mathrm{T}}y,$$

这个唯一解 $\hat{\beta}$ 称为回归系数 β 的**最小二乘估计**．相应地，误差方差 σ^2 的最小二乘估计为

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{\|y - X\hat{\beta}\|^2}{n - p}.$$

1.2.2 最小二乘估计的性质

最小二乘估计具有下列重要性质：

1° 无偏性 $E(\hat{\beta}) = \beta, E(\widehat{\sigma^2}) = \sigma^2$.

2° $\text{cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2(X^{\mathrm{T}}X)^{-1}$.

3° （高斯 - 马尔可夫定理） 设 c 为任一 $p \times 1$ 非随机向量，在 $c^{\mathrm{T}}\beta$ 的所有线性无偏估计类中，最小二乘估计 $c^{\mathrm{T}}\hat{\beta}$ 是唯一的方差最小的无偏估计，即 $c^{\mathrm{T}}\hat{\beta}$ 为 $c^{\mathrm{T}}\beta$ 的最佳线性无偏估计．

4° 如果进一步假设 e_i 服从正态分布，即 $e_i \sim N(0, \sigma^2)$，则

$$\hat{\beta} \sim N(\beta, \sigma^2(X^{\mathrm{T}}X)^{-1}),$$

$$(n - p)\widehat{\sigma^2} \sim \sigma^2\chi^2_{n-p},$$

并且对于任意的 $p \times 1$ 向量 c，$c^{\mathrm{T}}\hat{\beta}$ 与 $\widehat{\sigma^2}$ 相互独立．这里记号 $N(\mu, \Sigma)$ 表示均值向量为 μ，协方差阵为 Σ 的多元正态分布，χ^2_m 表示自由度为 m 的卡方分布．

1.2.3 中心化和标准化

记

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{ij} \qquad (j = 1, 2, \cdots, p - 1),$$

$\bar{x}_j$ 就是第 j 个回归自变量 n 次取值的平均值．将式(1-2)改写为

$$y_i = \alpha + (x_{i1} - \bar{x}_1)\beta_1 + \cdots + (x_{i,p-1} - \bar{x}_{p-1})\beta_{p-1} + e_i \qquad (i = 1, 2, \cdots, n), \tag{1-9}$$

其中 α 与式(1-2)中的 β_0 有如下关系：

$$\alpha = \beta_0 + \bar{x}_1\beta_1 + \bar{x}_2\beta_2 + \cdots + \bar{x}_{p-1}\beta_{p-1}.$$

在式(1-9)中，每个回归自变量都减去了它们各自的平均值，这称为中心化．若记

$$\boldsymbol{X}_c = \begin{bmatrix} x_{11}-\bar{x}_1 & x_{12}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{1,p-1}-\bar{x}_{p-1} \\ x_{21}-\bar{x}_1 & x_{22}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{2,p-1}-\bar{x}_{p-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1}-\bar{x}_1 & x_{n2}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{n,p-1}-\bar{x}_{p-1} \end{bmatrix},$$

则式(1-9)变形为

$$\boldsymbol{y} = \alpha\boldsymbol{1}_n + \boldsymbol{X}_c\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{e}. \tag{1-10}$$

其中 $\boldsymbol{1}_n$ 表示所有分量皆为1的 $n\times 1$ 向量，为符号简单计，在不致引起混淆时，常常略去下标 n，简记为 $\boldsymbol{1}$；$\boldsymbol{\beta} = (\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_{p-1})^{\mathrm{T}}$. 在这个模型中，常数项 α 和回归系数 $\boldsymbol{\beta}$ 分离出来了，并且设计矩阵 $\boldsymbol{X}_c$ 满足

$$\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c = 0,$$

也就是说，$\boldsymbol{X}_c$ 的每个列向量的 n 个元素之和等于零．对于模型式(1-10)，正则方程为

$$\begin{bmatrix} n & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{bmatrix},$$

等价于

$$\begin{cases} n\alpha = \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \\ \boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}. \end{cases}$$

于是，常数项 α 和回归系数 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计为

$$\hat{\alpha} = \bar{y},$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c)^{-1}\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \tag{1-11}$$

其中

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^{n} y_i.$$

可见，对于经过中心化的线性回归模型式(1-10)，回归常数项 α 的最小二乘估计总是等于因变量观测值的平均值 $\bar{y}$，而回归系数 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c)^{-1}\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 等于用线性回归模型 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}_c\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{e}$ 按原来的最小二乘估计公式计算得到的值．经过中心化，就把常数项和回归系数的估计分离开来了．在实际应用中，通常特别关心的是回归系数，因此中心化往往是很必要的．

对于中心化的线性回归模型式(1-10)，最小二乘估计具有下列性质：

1° 无偏性 $E(\hat{\alpha}) = \alpha$, $E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{\beta}$.

2° $\operatorname{cov}\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\boldsymbol{\beta}} \end{pmatrix} = \sigma^2\begin{bmatrix} \frac{1}{n} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & (\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c)^{-1} \end{bmatrix}.$

3° 若进一步假设 e_i 服从正态分布，即 $e_i \sim N(0,\sigma^2)$, $i = 1,2,\cdots,n$，则

$$\hat{\alpha} \sim N(\alpha, \frac{\sigma^2}{n}),$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} \sim N(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2(\boldsymbol{X}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_c)^{-1}),$$

且 $\hat{\alpha}$ 与 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 相互独立.

除了对自变量中心化外,对自变量常常做的另一种处理叫做标准化.记

$$s_j^2 = \sum_{i=1}^{n}(x_{ij} - \bar{x}_j)^2 \qquad (j = 1,2,\cdots,p-1),$$

那么,按

$$z_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j} \qquad (i = 1,2,\cdots,n, j = 1,2,\cdots,p-1).$$

进行变换的过程,称为标准化.即将 x_{ij} 进行中心化处理后,再除以 s_j.令 $\boldsymbol{Z} = [z_{ij}]$,则 $\boldsymbol{Z}$ 就是将原来的设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 经过中心化和标准化后得到的新设计矩阵.这个矩阵具有如下性质:

1° $\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z} = 0$.

2° 记 $\boldsymbol{R} = [r_{ij}] = \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}$,则

$$r_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{n}(x_{ki} - \bar{x}_i)(x_{kj} - \bar{x}_j)}{s_i s_j} \quad (i = 1,2,\cdots,n, j = 1,2,\cdots,p-1).$$

这里性质1°是中心化的结果,它表明新设计矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 的每一列元素之和等于零.性质2°则是中心化后再施以标准化的结果.如果把回归自变量都看成随机变量,$\boldsymbol{X}$ 的第 j 列为第 j 个回归自变量的容量为 n 的随机样本,那么 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}$ 的第 (i,j) 元正是第 i 个和第 j 个回归自变量的样本相关系数,因此 $\boldsymbol{R}$ 就是回归自变量的相关阵,$r_{ii} = 1, i = 1,2,\cdots,p-1$.这样做的好处有两条:其一是,利用 $\boldsymbol{R}$ 便于分析回归自变量之间的相依关系,因为从 r_{ij} 可以看出第 i 个和第 j 个回归自变量相依程度的大小;其二是,在一些问题中,诸回归自变量所用的单位不尽相同,取值范围也不一样,经过中心化和标准化后,消去了回归自变量的单位和取值范围的差异,这便于直接从比较回归系数估计值的大小来判断哪些回归自变量是重要的,哪些是不重要的.

需要注意的是,经过中心化和标准化的回归模型可以写为

$$y_i = \alpha + (\frac{x_{i1} - \bar{x}_1}{s_1})\beta_1 + \cdots + (\frac{x_{i,p-1} - \bar{x}_{p-1}}{s_{p-1}})\beta_{p-1} + e_i$$

$$(i = 1,2,\cdots,n).$$

这里的 α 和 β 当然和式(1-9)中的 α 和 β 不相同.上面的模型等价于

$$\boldsymbol{y} = \alpha\boldsymbol{1} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{e}.$$

当对这个模型求到了 α 和 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计

$$\hat{\alpha} = \bar{y},$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{Z}^{-1}\boldsymbol{Z})^{-1}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

之后,对应的经验回归方程应为

$$\widehat{Y}=\widehat{\alpha}+(\frac{X_1-\bar{x}_1}{s_1})\widehat{\beta}_1+\cdots+(\frac{X_{p-1}-\bar{x}_{p-1}}{s_{p-1}})\widehat{\beta}_{p-1}$$

$$=(\widehat{\alpha}-\sum_{i=1}^{p-1}\frac{\bar{x}_i}{s_i}\widehat{\beta}_i)+\sum_{i=1}^{p-1}(\frac{\widehat{\beta}_i}{s_i})X_i.$$

1.2.4 约束最小二乘估计

设 $\boldsymbol{A}$ 为 $k\times p$ 已知矩阵,其秩为 k,$\boldsymbol{b}$ 为 $k\times 1$ 已知向量,$\boldsymbol{A\beta}=\boldsymbol{b}$ 为相容线性方程组.将 $\boldsymbol{A\beta}=\boldsymbol{b}$ 视为 $\boldsymbol{\beta}$ 的一组约束条件,那么,在此约束条件下,线性回归模型

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{X\beta}+\boldsymbol{e},E(\boldsymbol{e})=0,\mathrm{cov}(\boldsymbol{e})=\sigma^2\boldsymbol{I}$$

中 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计,可应用拉格朗日(J.L.Lagrange)乘子法得到:

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_A=\widehat{\boldsymbol{\beta}}-(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{-1}(\boldsymbol{A}\widehat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{b}),\tag{1-12}$$

其中 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}=(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 为 $\boldsymbol{\beta}$ 的无约束最小二乘估计.

1.2.5 广义最小二乘估计

对于一般线性回归模型

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{X\beta}+\boldsymbol{e},\quad E(\boldsymbol{e})=0,\quad \mathrm{cov}(\boldsymbol{e})=\sigma^2\boldsymbol{V},\tag{1-13}$$

其中 $\boldsymbol{V}$ 为 $n\times n$ 已知正定矩阵.使得 $(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\beta})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\beta})$ 达到最小的 $\boldsymbol{\beta}$,满足正则方程

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{X\beta}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{y}.$$

若假定 $n\times p$ 阶设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的秩为 p,它的解为

$$\boldsymbol{\beta}^*=(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{y},$$

则称 $\boldsymbol{\beta}^*$ 为 $\boldsymbol{\beta}$ 的广义最小二乘估计.对应的 σ^2 的一个估计为

$$\sigma^{2*}=\frac{(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\beta}^*)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\beta}^*)}{n-p}.$$

特别地,当 $\boldsymbol{V}$ 为对角矩阵时,称 $\boldsymbol{\beta}^*$ 为加权最小二乘估计.

广义最小二乘估计具有下列性质:

1° 无偏性 $E(\boldsymbol{\beta}^*)=\boldsymbol{\beta},\quad E(\sigma^{2*})=\sigma^2.$

2° $\mathrm{cov}(\boldsymbol{\beta}^*)=\sigma^2(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{X})^{-1}.$

3° 若 $e_i\sim N(0,\sigma^2)$,则

$$\boldsymbol{\beta}^*\sim N(\boldsymbol{\beta},\sigma^2(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{X})^{-1}),$$

$$(n-p)\sigma^{2*}\sim\sigma^2\chi^2_{n-p},$$

且对于任意 $p\times 1$ 向量 $\boldsymbol{c}$,$\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}^*$ 与 σ^{*2} 相互独立.

4° (高斯-马尔可夫定理) 对于任意 $p\times 1$ 阶非随机向量 $\boldsymbol{c}$,$\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}^*$ 为 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}$ 的唯一最佳线性无偏估计.

称 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}=(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 为模型式(1-13)中 $\boldsymbol{\beta}$ 的简单最小二乘估计,常常简称为最小二乘估计.很显然,一般说来,$\widehat{\boldsymbol{\beta}}\neq\boldsymbol{\beta}^*$,也就是说,$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ 不必是最优的.但是下列任

意一条都是 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{\beta}^{*}$ 的充分必要条件：

1° $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{Z}=0$.

其中 $\boldsymbol{Z}$ 为 $n\times(n-p)$ 矩阵，满足条件 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}=0$，且秩为 $n-p$.

2° 存在矩阵 $\boldsymbol{B}$，使得

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}.$$

3° $\boldsymbol{P}_{X}\boldsymbol{V}$ 为对称矩阵，这里

$$\boldsymbol{P}_{X}=\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}.$$

关于这一方面的详细讨论见文献[1]或[2].

1.3 回归模型的假设检验

假设误差服从正态分布．如无特殊说明，本节的假设检验只限于如下正态线性回归模型：

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{e},\quad \boldsymbol{e}\sim N(\boldsymbol{0},\sigma^{2}\boldsymbol{I}),\tag{1-14}$$

其中 $\boldsymbol{X}$ 为 $n\times p$ 矩阵，其秩为 p.

1.3.1 一般线性假设的检验

对于一般线性假设

$$H:\boldsymbol{A}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{b},$$

这里 $\boldsymbol{A}$ 为 $k\times p$ 矩阵，其秩为 k，并假定 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{b}$ 是相容的，那么，当假设 H 成立时，相对于线性回归模型式(1-14)的检验统计量

$$F=\frac{(\boldsymbol{A}\widehat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{b})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{-1}(\boldsymbol{A}\widehat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{b})/k}{\widehat{\sigma^{2}}}\tag{1-15}$$

服从 $F_{k,n-p}$ 分布，其中

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}=(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y},\quad \widehat{\sigma^{2}}=\frac{\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\|^{2}}{n-p}.$$

对于给定的水平 α，当 $F>F_{k,n-p}(\alpha)$ 时，拒绝原假设 H，这里 $F_{k,n-p}(\alpha)$ 为自由度为 $(k,n-p)$ 的 F 分布的上侧 α 分点．

若记 $\mathrm{RSS}=\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\|^{2}$，$\mathrm{RSS}_{H}=\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{A}\|^{2}$，

这里 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{A}$ 由式(1-12)给出，那么，显而易见，RSS 是无约束的残差平方和，而 RSS_{H} 是在 H_{0} 下的约束残差平方和．利用这两个平方和，统计量式(1-15)可改写为

$$F=\frac{\frac{1}{k}(\mathrm{RSS}_{H}-\mathrm{RSS})}{\frac{1}{n-p}\mathrm{RSS}}.\tag{1-16}$$

因此，直观上，F 统计量就是在约束条件下残差平方和的相对增加量．式(1-16)的好处是便于在计算上实现．

1.3.2 回归系数的检验

假定要检验正态线性回归模型式(1-14)的回归系数 $\beta_i = 0, 1 \leqslant i \leqslant p-1$. 注意到

$$\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_{p-1})^{\mathrm{T}}$$

其实是 1.3.1 小节中 $\boldsymbol{A} = (0,0,\cdots,0,1,0,\cdots,0)$, $b = 0$ 的特殊情形,其中 1 是 $\boldsymbol{A}$ 的第 $i+1$ 个分量. 若记

$$\boldsymbol{C} = [c_{ij}] = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1} \qquad (i, j = 0, 1, \cdots, p-1),$$

则由 1.3.1 小节可推出,回归系数 $\beta_i = 0$ 的检验统计量为

$$t_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{\sigma}\sqrt{c_{ii}}}.$$

当原假设 $\beta_i = 0$ 成立时, $t_i \sim t_{n-p}$. 于是,对于给定的水平 α, 当 $|t_i| > t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2}\right)$ 时拒绝原假设. 这里 $t_{n-p}(\alpha)$ 表示自由度为 $n-p$ 的 t 分布的上侧 α 分点.

1.3.3 回归方程的显著性检验

把正态线性回归模型式(1-14)改写成如下形式:

$$\boldsymbol{y} = \beta_0 \mathbf{1} + \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{e}, \qquad \boldsymbol{e} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \boldsymbol{I}).$$

这里常数项和回归系数是分离开来的, $\boldsymbol{X}$ 是 $n \times (p-1)$ 矩阵, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_{p-1})^{\mathrm{T}}$. 所谓回归方程的显著性检验,是指检验假设 $H_0: \boldsymbol{\beta} = 0$, 即所有回归系数都等于零的检验. 如果这个检验的结论是接受原假设,则表明所选的 $p-1$ 个自变量对因变量 Y 无影响或影响很小以致于可以忽略,这时经验回归方程的实用意义不大;相反,如果 H_0 被拒绝,则通常称回归方程通过了显著性检验或达到了显著性,这说明所选的 $p-1$ 个自变量作为一个整体对因变量 Y 确有一定影响,但是这里并不排除其中有一个或几个自变量对 Y 并无影响,即可能有某些 $\beta_i = 0$.

对于现在的原假设 $H: \boldsymbol{\beta} = 0$, F 统计量表达式式(1-16)中的分子除去因子 $\frac{1}{k}$ 的部分,通常称为回归平方和,记为 $\mathrm{SS}_{回}$, 即

$$\mathrm{SS}_{回} = \mathrm{RSS}_H - \mathrm{RSS}.$$

其中 $\mathrm{RSS}_H = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2$.

于是,相应的检验统计量

$$F = \frac{\frac{1}{p-1}\mathrm{SS}_{回}}{\frac{1}{n-p}\mathrm{RSS}}.$$

当原假设 $H: \boldsymbol{\beta} = 0$ 成立时, $F \sim F_{p-1, n-p}$. 于是对于给定的水平 α, 当 $F > F_{p-1, n-p}(\alpha)$ 时,拒绝原假设.

如果设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 是已经中心化了的,那么,

$$SS_{回} = \hat{\boldsymbol{\beta}}^{T}X^{T}\boldsymbol{y},$$

其中
$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (X^{T}X)^{-1}X^{T}\boldsymbol{y}.$$

1.3.4 异常点的检验

在统计学中,**异常点**(outlier)泛指在一组数据中与它们的主体不是来自同一分布的那些少数点.几何直观上,异常点的"异常"之处就是它们远离数据组的主体.这里度量"远离"的标准在不同的地方也有所不同.

为了方便,把正态线性回归模型式(1-14)改写成分量形式:

$$y_i = \boldsymbol{x}_i^{T}\boldsymbol{\beta} + e_i, \qquad e_i \sim N(\boldsymbol{0},\sigma^2)(i = 1,2,\cdots,n), \tag{1-17}$$

其中 $e_1,e_2,\cdots,e_n$ 相互独立;$\boldsymbol{x}_i^{T}$ 表示设计矩阵 X 的第 i 行,即 $X = (\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n)^{T}$.于是,如果模型包含常数项,$\boldsymbol{x}_i$ 的第 1 个分量就为 1,则称第 j 组数据$(\boldsymbol{x}_j^{T},y_j)$是一个异常点,如果 y_j 与它的均值 $\boldsymbol{x}_j^{T}\boldsymbol{\beta}$ 之差很大(发生这种情况的原因是,$E(y_j)$ 发生了非随机漂移 η:$E(y_j) = \boldsymbol{x}_j^{T}\boldsymbol{\beta} + \eta$),则会有一个新模型

$$\begin{cases} y_i = \boldsymbol{x}_i^{T}\boldsymbol{\beta} + e_i & (i \neq j), \\ y_j = \boldsymbol{x}_j^{T}\boldsymbol{\beta} + \eta + e_j & (e_i \sim N(0,\sigma^2), i = 1,2,\cdots,n). \end{cases} \tag{1-18}$$

记 $\boldsymbol{d}_j = (0,\cdots,0,1,0,\cdots,0)^{T}$.这是一个 n 维向量,它的第 j 个分量为 1,其余分量均为零.将模型式(1-18)写成矩阵形式,得

$$\boldsymbol{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{d}_j\eta + \boldsymbol{e}, \qquad \boldsymbol{e} \sim N(\boldsymbol{0},\sigma^2 \boldsymbol{I}). \tag{1-19}$$

这个模型称为均值漂移线性回归模型.要判定$(\boldsymbol{x}_j^{T},y_j)$是否异常点,等价于在式(1-19)中检验假设 H:$\eta = 0$.

记

$$\hat{\boldsymbol{e}} = (\hat{e}_1,\hat{e}_2,\cdots,\hat{e}_n)^{T} = \boldsymbol{y} - X\hat{\boldsymbol{\beta}},$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (X^{T}X)^{-1}X^{T}\boldsymbol{y}$,$\hat{\sigma}^2 = \|\boldsymbol{y} - X\hat{\boldsymbol{\beta}}\|^2/(n-p)$,分别是从模型式(1-17)得到的 β 和 σ^2 的最小二乘估计;$\hat{\boldsymbol{e}}$ 称为**残差向量**.记 $H = [h_{ij}] = X(X^{T}X)^{-1}X^{T}$,

$$r_j = \frac{\hat{e}_j}{\hat{\sigma}\sqrt{1 - h_{jj}}},$$

称 r_j 为学生化(studentized)残差.应用式(1-15)及这些记号,可得到如下结论:

对于均值漂移正态线性回归模型式(1-19),若假设 H:$\eta = 0$ 成立,则

$$F_j = \frac{(n-p-1)r_j^2}{n-p-r_j^2} \sim F_{1,n-p-1}.$$

于是,有如下检验:对于给定的 α,$0 < \alpha < 1$,若

$$F_j > F_{1,n-p}(\alpha),$$

则判定第 j 组数据$(\boldsymbol{x}_j^{T},y_j)$为异常点.

1.4 置信区间与预测

设正态线性回归模型

$$y = X\beta + e, \quad e \sim N(0, \sigma^2 I),$$

其中,设计矩阵 X 为 $n \times p$ 矩阵,其秩为 p. 记

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y, \hat{\sigma}^2 = \frac{\| y - X\hat{\beta} \|^2}{n - p}.$$

1.4.1 置信椭球

设 $a_i^T\beta (i = 1,2,\cdots,k)$ 为 β 的 k 个线性无关的线性组合. 记 $A = (a_1, a_2, \cdots, a_k)^T$,则 $A\beta$ 的置信系数为 $1-\alpha$ 的置信椭球为

$$(A\beta - A\hat{\beta})^T (A(X^T X)^{-1} A^T)^{-1} (A\beta - A\hat{\beta}) \leqslant k\hat{\sigma}^2 F_{k,n-p}(\alpha).$$

1.4.2 回归系数线性组合的置信区间

设 a 为已知的 $p \times 1$ 向量,线性组合 $a^T\beta$ 的置信系数为 $1-\alpha$ 的置信区间为

$$\left(a^T\hat{\beta} - t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\hat{\sigma}_{a^T\hat{\beta}}, a^T\hat{\beta} + t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\hat{\sigma}_{a^T\hat{\beta}}\right),$$

其中

$$\hat{\sigma}_{a^T\hat{\beta}} = (\widehat{\mathrm{var}}(a^T\hat{\beta}))^{\frac{1}{2}} = \hat{\sigma}(a^T(X^T X)^{-1} a)^{1/2}.$$

1.4.3 回归系数的置信区间

回归系数 β_i 的置信系数为 $1-\alpha$ 的置信区间为

$$\left(\hat{\beta}_i - t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_i}, \hat{\beta}_i + t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_i}\right),$$

其中

$$\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_i} = (\widehat{\mathrm{var}}(\hat{\beta}_i))^{1/2} = \hat{\sigma} c_{ii},$$

$$C = [c_{ij}] = (X^T X)^{-1} \qquad (i, j = 0, 1, \cdots, p-1).$$

需要注意的是,$\beta = (\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_{p-1})^T$,为了下标对应,这里将矩阵 C 的下标从 0 标起,即它的第一行的元素为 $c_{01}, c_{02}, \cdots, c_{0,p-1}$,余类推.

1.4.4 邦菲洛尼同时置信区间

k 个回归系数 $\beta_{i_1}, \beta_{i_2}, \cdots, \beta_{i_k}$ 的置信系数为 $1-\alpha$ 的邦菲洛尼(Bonferroni)同时置信区间为

$$\left(\hat{\beta}_{i_j} - t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2k}\right)\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_{i_j}}, \hat{\beta}_{i_j} + t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2k}\right)\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_{i_j}}\right) \qquad (j = 1, 2, \cdots, k),$$

其中

$$\widehat{\sigma}_{\widehat{\beta}_{i_j}} = (\widehat{\mathrm{var}}(\widehat{\beta}_{i_j}))^{1/2} = \widehat{\sigma} c_{i_j i_j} \qquad (j = 1,2,\cdots,k).$$

k 个线性组合 $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}(i = 1,2,\cdots,k)$ 的置信系数为 $1-\alpha$ 的邦非洛尼同时置信区间为

$$\left(\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}} - t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2k}\right)\widehat{\sigma}_{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}}, \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}} + t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2k}\right)\widehat{\sigma}_{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}}\right) \qquad (i = 1,2,\cdots,k),$$

其中

$$\widehat{\sigma}_{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}} = (\widehat{\mathrm{var}}(\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}))^{1/2} = \widehat{\sigma}(\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{a}_i)^{1/2} \qquad (i = 1,2,\cdots,k).$$

1.4.5 谢菲同时置信区间

对于一切线性函数 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}$，置信系数为 $1-\alpha$ 的谢菲(Scheffé)同时置信区间为

$$\left(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}} - (pF_{p,n-p}(\alpha))^{1/2}\widehat{\sigma}_{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}}, \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}} + (pF_{p,n-p}(\alpha))^{1/2}\widehat{\sigma}_{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}}\right).$$

1.4.6 点预测

对于新试验点 $\boldsymbol{x}_0$，其对应的因变量 Y 的值 $y_0 = \boldsymbol{x}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta} + e_0$ 的点预测为 $\widehat{y}_0 = \boldsymbol{x}_0^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}$. 注意，这里的 $\boldsymbol{x}_0$ 也可以是原来几个试验点 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n$ 中的一个.

点预测 $\widehat{y}_0$ 的基本性质：

1° $\widehat{y}_0$ 是 y_0 的无偏预测，即 $E(\widehat{y}_0 - y_0) = 0$.

2° 在 y_0 的一切线性无偏预测中，$\widehat{y}_0$ 具有最小预测均方误差，即设 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 为 y_0 的任一无偏预测，必有

$$E(\widehat{y}_0 - y_0)^2 \leqslant E(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} - y_0)^2.$$

1.4.7 区间预测

考虑在 k 个新试验点 $\boldsymbol{x}_{n+1}, \boldsymbol{x}_{n+2}, \cdots, \boldsymbol{x}_{n+k}$ 处对应的因变量 Y 的值 $y_{n+1}, y_{n+2}, \cdots, y_{n+m}$ 的区间预测.

(1) 邦非洛尼型同时预测区间 $y_{n+1}, y_{n+2}, \cdots, y_{n+k}$ 同时分别落在下面预测区间的概率为 $1-\alpha$：

$$\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}} \pm t_{n-p}\left(\frac{\alpha}{2k}\right)\widehat{\sigma}(1 + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{x}_i)^{1/2} \qquad (i = 1,2,\cdots,k).$$

(2) 谢非型同时预测区间 $y_{n+1}, y_{n+2}, \cdots, y_{n+k}$ 同时分别落在下面预测区间的概率为 $1-\alpha$：

$$\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}} \pm (kF_{k,n-p}(\alpha))^{1/2}\widehat{\sigma}(1 + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{x}_i)^{1/2} \qquad (i = 1,2,\cdots,k).$$

1.5 有偏估计

回归系数的最小二乘估计具有许多优良性质,其中最重要的是高斯-马尔可夫定理.它表明在一切线性无偏估计中,最小二乘估计具有最小方差.如果进一步假设模型误差服从正态分布,那么最小二乘估计不仅也服从正态分布,而且还具有其他一些优良性.正是这些原因,最小二乘估计在线性回归估计和检验理论中占有十分重要的地位,并得到了广泛的应用.但是随着电子计算机技术的飞速发展,人们愈来愈多地去处理含有较多回归自变量的大型回归问题,这种大型回归问题的最小二乘估计往往不能令人们满意.例如,有些回归系数的最小二乘估计的值异常大或它们的符号与问题的实际意义相违背.产生这些问题的原因之一是,对于大型回归问题,回归自变量之间往往存在着近似线性关系,称为复共线性(multicollinerarity).为了克服复共线性对回归系数的最小二乘估计所产生的影响,近30年来人们相继提出了许多有偏估计,其中最重要的是岭估计、广义岭估计和主成分估计.

在有偏估计的研究中,采用均方误差(mean squared errors,以下简记为MSE)作为评价一个估计优劣的标准.

1.5.1 均方误差

设 $\boldsymbol{\theta}$ 为 $p\times 1$ 未知参数向量,$\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ 为 $\boldsymbol{\theta}$ 的一个估计.定义 $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ 的均方误差为

$$\mathrm{MSE}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) = E\|\tilde{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta}\|^2 = E\{(\tilde{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})^{\mathrm{T}}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})\}.$$

它度量了估计 $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ 跟未知参数 $\boldsymbol{\theta}$ 偏离的平均值的大小.一个好的估计应该有较小的均方误差.

均方误差具有如下分解:

$$\mathrm{MSE}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) = \mathrm{tr}\,\mathrm{cov}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) + \|E\tilde{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta}\|^2,$$

其中 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$ 表示方阵 $\boldsymbol{A}$ 的迹,即 $\boldsymbol{A}$ 的对角线元素之和.上式右端第一项是估计 $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ 各分量的方差之和,而第二项是 $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ 的各分量的偏差平方和.

考虑线性回归模型

$$\boldsymbol{y} = \beta_0\mathbf{1} + \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{e},\quad E(\boldsymbol{e}) = 0,\quad \mathrm{cov}(\boldsymbol{e}) = \sigma^2\boldsymbol{I}, \tag{1-20}$$

假定设计矩阵 $\boldsymbol{X}_{n\times(p-1)}$ 已经中心化和标准化,并且秩为 $p-1$.于是 β_0 和 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计为

$$\hat{\beta}_0 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i,$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}.$$

最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的均方误差为

$$\text{MSE}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2 \text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X})^{-1} = \sigma^2 \sum_{i=1}^{p-1} \frac{1}{\lambda_i}.$$

其中 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_{p-1}$ 为 $\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X}$ 的特征值．从这里可以看出，如果 $\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X}$ 至少有一个特征值很小，即非常接近于零(注意，因为 $\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X}$ 是一个正定矩阵，于是它的所有特征值都是正的)，则 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$的均方误差就会很大，这时就有理由认为，最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$不再是一个好的估计．

1.5.2 复共线性、病态、条件数

设 λ 为$\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X}$的任一特征值，$\boldsymbol{\varphi}$ 为其对应的特征向量，其长度为1，即 $\|\boldsymbol{\varphi}\| = 1$. 若 $\lambda \approx 0$,则

$$\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\varphi} = \lambda\boldsymbol{\varphi} \approx 0,$$

于是，

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{\varphi} \approx 0.$$

若记 $\boldsymbol{\varphi} = (c_1, c_2, \cdots, c_{p-1})^\text{T}$, $\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{x}_{(1)}, \boldsymbol{x}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{x}_{(p-1)})$, 即 $\boldsymbol{x}_{(1)}, \boldsymbol{x}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{x}_{(p-1)}$ 为 $\boldsymbol{X}$ 的$p-1$ 个列向量，则上式即为

$$c_1\boldsymbol{x}_{(1)} + c_2\boldsymbol{x}_{(2)} + \cdots + c_{(p-1)}\boldsymbol{x}_{(p-1)} \approx 0.$$

这表明，设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的列向量$\boldsymbol{x}_{(1)}, \boldsymbol{x}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{x}_{(p-1)}$之间有上述近似线性关系．如果用 $X_1, X_2, \cdots, X_{p-1}$ 分别表示 $p-1$ 个回归自变量，那么上式说明，从现有的 n 组看，回归自变量之间有近似线性关系：

$$c_1X_1 + c_2X_2 + \cdots + c_{p-1}X_{p-1} \approx 0.$$

回归自变量之间的这种近似关系称为复共线关系，相应地，称设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 或线性回归模型式(1-20) 存在**复共线性**，也称设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 是**病态**的．

度量复共线性严重程度或病态严重程度的一个重要量是设计矩阵 $\boldsymbol{X}$(或$\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X}$) 的**条件数**，定义条件数

$$\kappa = \frac{\lambda_1}{\lambda_p},$$

即 $\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X}$ 的最大特征值与最小特征值之比．从实际应用的经验角度来看，一般若 $\kappa < 100$,则认为复共线性的程度很小；若 $100 \leqslant \kappa \leqslant 1000$,则认为存在中等程度或较强的复共线性；若 $\kappa > 1000$,则认为存在严重的复共线性．

1.5.3 岭估计

岭(ridge) 估计是应用最广泛的一种有偏估计．对于线性回归模型式(1-20)，回归系数 $\boldsymbol{\beta}$ 的**岭估计**定义为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(k) = (\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X} + k\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{y},$$

这里 $k > 0$是待选择的参数，称为岭参数．当 k 取不同值时，可得到不同估计，因此岭估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$ 是一个估计类．

岭估计具有下列性质：

1° 有偏性　对于任意 $k \neq 0$, $E\hat{\boldsymbol{\beta}}(k) \neq \boldsymbol{\beta}$.

2° 存在 $k > 0$,使得岭估计比最小二乘估计有较小的均方误差,即

$$\mathrm{MSE}(\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)) < \mathrm{MSE}(\hat{\boldsymbol{\beta}}). \tag{1-21}$$

需要指出,使上式成立的 k 依赖于模型参数 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2. 换句话说,使式(1-21)成立的 $\boldsymbol{\beta}$ 需要满足一定条件,式(1-21)只是对于参数空间上某个区域成立.

在实际应用中,一个重要问题是如何选择岭参数 k. 选择 k 的方法主要有如下几种:

1. 霍尔-肯纳德公式

记 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_{p-1}$ 为 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的特征值, $\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2, \cdots, \boldsymbol{\varphi}_{p-1}$ 为对应的标准正交化特征向量. 命 $\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{p-1})$, $\boldsymbol{\Phi} = (\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2, \cdots, \boldsymbol{\varphi}_{p-1})$, $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X\Phi}$, $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}$,再记

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}.$$

霍尔-肯纳德(Hoerl-Kennard)选择 k 的公式为

$$\hat{k} = \frac{\hat{\sigma}^2}{\max\limits_i \hat{\alpha}_i^2}, \tag{1-22}$$

其中 $\hat{\alpha}_i$ 为 $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ 的第 i 个分量, $\hat{\sigma}^2 = \| \boldsymbol{y} - \hat{\beta}_0\mathbf{1} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} \|^2/(n-p)$.

2. 劳利斯-王公式

劳利斯-王(Lawless-Wang)选择 k 的公式为

$$\hat{k} = \frac{(p-1)\hat{\sigma}^2}{\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}}.$$

3. 霍尔-肯纳德-鲍德温公式

霍尔-肯纳德-鲍德温(Hoerr-Kennard-Baldwin)选择 k 的公式为

$$\hat{k} = \frac{(p-1)\hat{\sigma}^2}{\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{\beta}}}.$$

4. 岭迹法

所谓岭迹,就是以岭估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}(k)$ 的各分量 $\hat{\beta}_i(k)$ 作为 k 的函数的图形. 选择 k 的岭迹法就是将每个分量 $\hat{\beta}_i(k)(i = 1, 2, \cdots, p-1)$ 的岭迹画在同一张坐标纸上,选择 k 使得各个回归系数的岭估计大体上处于比较稳定状态并且没有不合理的符号;同时适当兼顾残差平方和不要上升太多等因素.

1.5.4 广义岭估计

广义岭估计定义为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{K}) = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{\Phi K \Phi}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y},$$

其中 $\boldsymbol{\Phi}$ 为由 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的标准正交化特征向量组成的 $p-1$ 阶正交矩阵; $\boldsymbol{K} = \mathrm{diag}(k_1, k_2,$

$\cdots,k_{p-1})$. 显然，当 $k_1 = k_2 = \cdots = k_{p-1}$ 时，广义岭估计就变为岭估计.

广义岭估计具有下列性质：

1° 有偏性，对于一切 $\boldsymbol{K} \neq 0$, $E\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{K}) \neq \boldsymbol{\beta}$.

2° 存在对角矩阵 $\boldsymbol{K}$，使得广义岭估计比最小二乘估计有较小的均方误差，即

$$\mathrm{MSE}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{K})) < \mathrm{MSE}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}).$$

事实上，$\mathrm{MSE}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{K}))$ 的最小值在

$$k_i = \frac{\sigma^2}{\alpha_i^2} \qquad (i = 1,2,\cdots,p-1)$$

时达到. 在应用上这些 k_i 值采用如下估计值：

$$\widehat{k}_i = \frac{\widehat{\sigma^2}}{\widehat{\alpha_i^2}} \qquad (i = 1,2,\cdots,p-1),$$

其中 $\widehat{\alpha}_i$ 的定义与式(1-22)$\widehat{\alpha}_i$ 的相同.

1.5.5 主成分估计

对于线性回归模型式(1-20)，记 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_{p-1}$ 为 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的特征值，$\boldsymbol{\varphi}_1,\boldsymbol{\varphi}_2,\cdots,\boldsymbol{\varphi}_{p-1}$ 为对应的标准正交化特征向量，记 $\boldsymbol{\Phi} = (\boldsymbol{\varphi}_1,\boldsymbol{\varphi}_2,\cdots,\boldsymbol{\varphi}_{p-1})$，这是$(p-1)\times(p-1)$ 正交矩阵. 令 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X\Phi}$, $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}$，则模型式(1-20) 化为

$$\boldsymbol{y} = \beta_0\mathbf{1} + \boldsymbol{Z\alpha} + \boldsymbol{e}, \quad E(\boldsymbol{e}) = 0, \quad \mathrm{cov}(\boldsymbol{e}) = \sigma^2\boldsymbol{I}, \qquad (1\text{-}23)$$

称为模型式(1-20) 的典则形式，$\boldsymbol{\alpha}$ 称为典则回归系数，新的设计矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 的列是原来回归自变量的主成分. 假定 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的后 $p-r-1$ 个特征值很小，即 $\lambda_{r+1},\lambda_{r+2},\cdots,\lambda_{p-1}$ 皆约为 0，则从模型式(1-23) 中剔除后面的 $p-r-1$ 个自变量(即主成分)，等价于用零来估计它们对应的参数值：$\alpha_{r+1} = \alpha_{r+2} = \cdots = \alpha_{p-1} = 0$. 对于剩余的回归系数，用最小二乘估计作为它们的估计. 对于 $\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{p-1})$，$\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\Phi}$ 和 $\boldsymbol{Z}$，做相应分块：

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Lambda}_{(1)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\Lambda}_{(2)} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_{(1)} \\ \boldsymbol{\alpha}_{(2)} \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{Z}_{(1)} \vdots \boldsymbol{Z}_{(2)}], \quad \boldsymbol{\Phi} = [\boldsymbol{\Phi}_{(1)} \vdots \boldsymbol{\Phi}_{(2)}],$$

其中 $\boldsymbol{\Lambda}_{(1)}$ 为 $r\times r$ 矩阵，$\boldsymbol{\alpha}_{(1)}$ 为 $r\times 1$ 向量，$\boldsymbol{Z}_{(1)}$ 和 $\boldsymbol{\Phi}_{(1)}$ 分别为 $n\times r$ 和$(p-1)\times r$ 矩阵. 于是对于典则回归系数 $\boldsymbol{\alpha}$，得到的估计为

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_{(1)} = \boldsymbol{\Lambda}_{(1)}^{-1}\boldsymbol{Z}_{(1)}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \quad \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_{(2)} = 0.$$

从关系式 $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\Phi\alpha}$，得到 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计

$$\widetilde{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{\Phi}\begin{bmatrix} \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_{(1)} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Phi}_{(1)}\boldsymbol{\Lambda}_{(1)}^{-1}\boldsymbol{Z}_{(1)}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y},$$

称为 $\boldsymbol{\beta}$ 的**主成分估计**.

主成分估计具有下列性质：

1° $\tilde{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{\Phi}_{(1)}\boldsymbol{\Phi}_{(1)}^{T}\hat{\boldsymbol{\beta}}$,即主成分估计是最小二乘估计的一个线性变换.

2° 主成分估计是有偏估计,因为只要保留的主成分个数 $r < p-1$,就有

$$E\tilde{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{\Phi}_{(1)}\boldsymbol{\Phi}_{(1)}^{T}\boldsymbol{\beta} \neq \boldsymbol{\beta}.$$

3° 当设计阵呈病态时,适当选择保留的主成分个数 r,可使主成分估计比最小二乘估计有较小的均方误差,即

$$\mathrm{MSE}(\tilde{\boldsymbol{\beta}}) < \mathrm{MSE}(\hat{\boldsymbol{\beta}}).$$

1.5.6 有偏估计的比较

大量的计算机模拟研究和应用实践表明,当设计矩阵呈较严重的病态时,有偏估计确实在均方误差意义下能够改进最小二乘估计,但是在所有有偏估计中,还没有一个估计能够一致优于其他估计.一般说来,每种有偏估计的统计性质的优劣与设计矩阵本身以及它的病态程度、回归系数真值在参数空间中所处的位置等都有关系.

关于有偏估计的详细讨论,读者可参考文献[3].

1.6 回归诊断

1.6.1 回归诊断研究的基本问题

概括起来,回归诊断所要研究的问题分为两类:

1. 模型诊断

在线性回归模型的估计与检验中,最主要的假设是关于模型误差的高斯-马尔可夫假设.即要求模型误差 e_i 满足下列条件:

1° $E(e_i) = 0 \quad (i = 1,2,\cdots,n)$;

2° $\mathrm{var}(e_i) = \sigma^2 \quad (i = 1,2,\cdots,n)$;

3° $\mathrm{cov}(e_i, e_j) = 0 \quad (i \neq j, i,j = 1,2,\cdots,n)$.

对于有些问题,还假设 e_i 服从正态分布.那么,在一个实际应用的场合,有了一批实际数据后,怎样考察这些数据能够基本上满足这些假设呢?这就是回归诊断中要研究的一个基本问题,称为模型诊断问题.因为这些假设条件都是关于误差项的,所以要解决这个问题很自然就要从分析它们的估计量——残差的角度来解决.正是由于这个原因,这部分内容在不少文献中也称为残差分析.

2. 数据诊断

所谓数据诊断就是探查对回归估计、检验或预测有很大影响的数据.这些数据称为强影响数据.因为一组数据在几何上对应于空间的一个点,所以也把这些数据称为强影响点.在线性回归分析中,希望每组观测数据对统计推断具有一定影响,但这种影响也不能过大,这样得到的经验回归方程或预测才具有一定的稳定性.这一部分内容在不少文献中也称为影响分析.

1.6.2 残差

下面讨论一般线性回归模型

$$y = X\beta + e,\quad E(e) = 0,\quad \mathrm{cov}(e) = \sigma^2 I, \tag{1-24}$$

其中 X 为 $n \times p$ 设计矩阵，且秩为 p，$x_1^T, x_2^T, \cdots, x_n^T$ 表示 X 的 n 个行向量．

1. 普通残差

称 $\hat{e}_i = y_i - x_i^T\hat{\beta}$ 为第 i 个试验点处的普通残差，称 $\hat{e} = (e_1^T, e_2^T, \cdots, e_n^T)^T$ 为普通残差向量．在不致引起混淆时，常常省略"普通"二字，分别简称为残差和残差向量．这里 $\hat{\beta} = (X^TX)^{-1}X^Ty$ 是 β 的最小二乘估计．记 $\hat{y}_i = x_i^T\hat{\beta}$，$\hat{y}_i$ 称为第 i 个拟合值，$\hat{y} = (\hat{y}_1, \hat{y}_2, \cdots, \hat{y}_n)^T$ 称为拟合值向量．

残差向量具有下列性质：

1° $E(\hat{e}) = 0, \mathrm{cov}(\hat{e}) = \sigma^2(I - H)$，这里 $H = X(X^TX)^{-1}X^T$.

2° 若 $e \sim N(0, \sigma^2 I)$，则 $\hat{e} \sim N(0, \sigma^2(I - H))$，且与 $\hat{y}$ 相互独立．

2. 学生化残差

记

$$r_i = \frac{\hat{e}_i}{\hat{\sigma}\sqrt{1 - h_{ii}}} \qquad (i = 1, 2, \cdots, n),$$

其中 $\hat{\sigma}^2 = \|y - X\hat{\beta}\|^2/(n - p)$．记 h_{ii} 为帽子矩阵 $H = X(X^TX)^{-1}X^T$ 的第 i 个对角元．r_i 称为学生化残差．r_i 的一个最重要的性质是，当 e_i 服从正态分布 $N(0, \sigma^2)$ 时，r_i 近似服从 $N(0,1)$，且彼此相互独立．

1.6.3 残差图

以残差为纵坐标，以拟合值 $\hat{y}_i$ 或对应的数据观测序号 i 或数据观测时间等为横坐标的散点图统称为**残差图**．残差图是进行模型诊断的重要工具．

以学生化残差图为例．图 1-1 是以 $\hat{r}_i$ 为纵坐标，$\hat{y}_i$ 为横坐标的残差图．如果高斯－马尔可夫假设成立，且 e_i 服从正态分布时，学生化残差 r_i 近似服从标准正态分布，且相互独立，并与 $\hat{y}_i$ 也独立，那么 r_i 就可以视为来自标准正态总体 $N(0,1)$ 的一组随机样本．

根据正态分布的性质，若 $U \sim N(\mu, \sigma^2)$，则

$$P(\mu - 2\sigma < U < \mu + 2\sigma) = 95.4\%.$$

就本例的假设而言，$\mu = 0, \sigma = 1$，则应大约有 95.4% 的 r_i 落在 $[-2, 2]$ 的区域中，且不呈现任何趋势．

图 1-1(a) 显示，现在的数据基本上满足上述条件．换句话说，可以认为 $e \sim N(0, \sigma^2 I)$ 是一个合理的假设．而图 1-1(b) ~ (d) 则显示了误差等方差，即 $\mathrm{var}(e_i)$

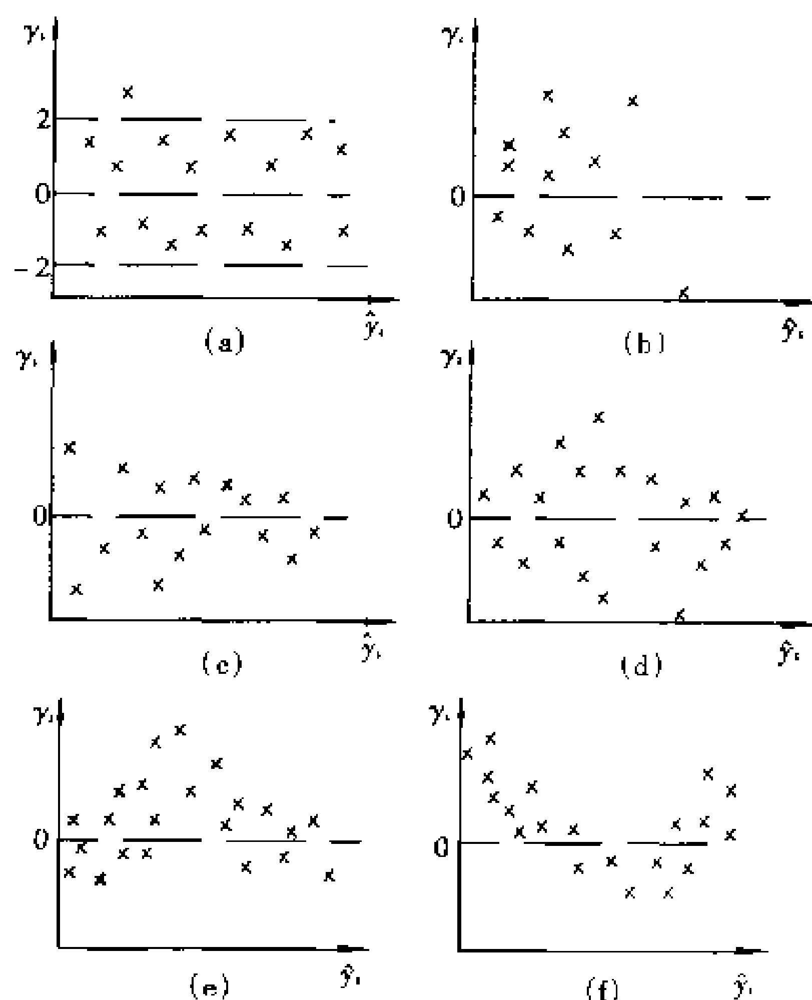


图 1-1

$= \sigma^2(i = 1,\cdots,n)$ 的假设不满足. 图 1-1(e) 和(f) 则表明回归函数可能是非线性的,或者误差 e_i 之间具有一定相关性或漏掉了一个甚至多个回归自变量. 究竟属于哪一种情况,还需要进一步的诊断.

1.6.4 强影响点

用 $\boldsymbol{y}_{(i)},\boldsymbol{X}_{(i)}$ 和 $\boldsymbol{e}_{(i)}$ 分别表示从 $\boldsymbol{y},\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{e}$ 中剔除第 i 行或第 i 个分量后所得到的矩阵或向量. 从模型式(1-24)剔除第 i 组数据$(\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}},y_i)$之后,剩余的 $n-1$ 组数据的线性回归模型为

$$\boldsymbol{y}_{(i)} = \boldsymbol{X}_{(i)}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{e}_{(i)}, E(\boldsymbol{e}_{(i)}) = 0, \mathrm{cov}(\boldsymbol{e}_{(i)}) = \sigma^2\boldsymbol{I}_{n-1}, \tag{1-25}$$

将从这个模型求到的最小二乘估计记为 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$,则

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} = (\boldsymbol{X}_{(i)}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_{(i)})^{-1}\boldsymbol{X}_{(i)}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{(i)}.$$

很显然向量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}-\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$ 反映了第 i 组数据对回归系数估计的影响大小. 库克(Cook)统计量是度量这种影响大小的一种数量化指标,它定义为

$$D_i = \frac{(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X} (\hat{\boldsymbol{\beta}} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})}{p \hat{\sigma}^2} \qquad (i = 1, 2, \cdots, n).$$

这个定义不能用来做实际计算，因为它需要用到 $n+1$ 组回归系数，计算量太大．

计算 D_i 的简便公式为

$$D_i = \frac{1}{p}\left(\frac{h_{ii}}{1 - h_{ii}}\right) r_i^2 \qquad (i = 1, 2, \cdots, n),$$

其中 h_{ii} 是帽子矩阵 $\boldsymbol{H} = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 的第 i 个对角元素；r_i 是学生化残差．D_i 值相对很大的观察点，称为强影响点．

表 1-1

$\boldsymbol{M}$	c	化简形式
$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$	$p\hat{\sigma}^2$	$\frac{1}{p} r_i^2 \frac{h_{ii}}{1 - h_{ii}}$
$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$	$p\hat{\sigma}_{(i)}^2$	$\frac{1}{p} r_i^{*2} \frac{h_{ii}}{1 - h_{ii}}$
$\boldsymbol{X}_{(i)}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_{(i)}$	$p\hat{\sigma}^2$	$\frac{1}{p} r_i^2 h_{ii}$
$\boldsymbol{X}_{(i)}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_{(i)}$	$p\hat{\sigma}_{(i)}^2$	$\frac{1}{p} r_i^{*2} h_{ii}$
$\boldsymbol{I}$	$p\hat{\sigma}^2$	$\frac{1}{p} r_i^2 \frac{\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{(-2)}\boldsymbol{x}_i}{1 - h_{ii}}$
$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$	$\hat{\sigma}_{(i)}^2$	$r_i^{*2} \frac{h_{ii}}{1 - h_{ii}}$

推广的库克距离定义为

$$D_i(\boldsymbol{M}, c) = \frac{(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{M} (\hat{\boldsymbol{\beta}} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})}{c},$$

其中 $\boldsymbol{M}$ 是 $p \times p$ 正定矩阵；c 为正数．表 1-1 给出了 $\boldsymbol{M}$ 和 c 的几种选择．其中 $\hat{\sigma}_{(i)}^2$ 为从式(1-25)获得的 σ^2 的最小二乘估计，

$$\hat{\sigma}_{(i)}^2 = \frac{\| \boldsymbol{y}_{(i)} - \boldsymbol{X}_{(i)} \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} \|^2}{n - p - 1},$$

而 r_i^* 定义为

$$r_i^* = \frac{\hat{e}_i}{\hat{\sigma}_{(i)} \sqrt{1 - h_{ii}}} \qquad (i = 1, 2, \cdots, n).$$

对于探查出来的强影响点，从数学上没有统一的处理方法，一般说来需要根据问题的实际情况区别对待．往往应该首先去研究原始数据的获得全过程，检查在获取这些强影响点时，试验或生产过程有无异常现象发生，或数据记录或转抄或输入过程有无过失误差等等．如果存在过失误差或异常现象，那么这些数据应予以纠正或剔除，不然就需要采取一些更稳健的估计方法，以降低这些强影响点对估计的影响．

1.7 博克斯 - 考克斯变换

1.7.1 定义

如果由经验认为,误差不服从正态分布,则可考虑对因变量作适当变换,使变换后的新变量更接近正态分布.博克斯 - 考克斯(Box-Cox)变换是对回归因变量 Y 做如下变换:

$$Y^{(\lambda)}=\begin{cases}\dfrac{Y^{\lambda}-1}{\lambda} & (\lambda\neq 0),\\ \ln Y & (\lambda=0),\end{cases}$$

其中 λ 是一个待定变换参数.对于不同的 λ,所做的变换自然就不同,所以这是一个变换族.它包括了对数变换($\lambda=0$)、平方根变换($\lambda=1/2$)和倒数变换($\lambda=-1$)等常用变换.

1.7.2 变换参数 λ 的确定

对因变量 Y 的 n 个观测值 $y_1,y_2,\cdots,y_n$ 应用上述变换,得到变换后的向量

$$\boldsymbol{y}^{(\lambda)}=(y_1^{(\lambda)},y_2^{(\lambda)},\cdots,y_n^{(\lambda)})^{\mathrm{T}}.$$

要选择参数 λ,使得 $\boldsymbol{y}^{(\lambda)}$ 满足

$$\boldsymbol{y}^{(\lambda)}=\boldsymbol{X\beta}+\boldsymbol{e},\quad \boldsymbol{e}\sim N(\boldsymbol{0},\sigma^2\boldsymbol{I}).$$

这就是说,要求通过因变量的变换,使得变换过的向量 $\boldsymbol{y}^{(\lambda)}$ 与回归自变量之间具有线性相依关系,误差也服从正态分布,误差各分量具有相等的方差,且相互独立.

确定 λ 的极大似然方法如下:

$$J=\prod_{i=1}^{n}y_i^{\lambda-1},$$

$$\boldsymbol{z}^{(\lambda)}=\frac{\boldsymbol{y}^{(\lambda)}}{J^{1/n}},\tag{1-26}$$

$$\mathrm{RSS}(\lambda,\boldsymbol{z}^{(\lambda)})=\boldsymbol{z}^{(\lambda)}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{z}^{(\lambda)}.\tag{1-27}$$

使 $\mathrm{RSS}(\lambda,\boldsymbol{z}^{(\lambda)})$ 达到最小值的 λ 即为所求.因为这样的 λ 没有解析表达式,所以一般都用数值方法计算.具体计算步骤如下.

(1) 对于给定的 λ 值,计算 $\boldsymbol{z}^{(\lambda)}$.计算公式为

$$z_i^{(\lambda)}=\begin{cases}\dfrac{y_i^{(\lambda)}}{\left(\prod\limits_{i=1}^{n}y_i\right)^{\frac{\lambda-1}{n}}} & (\lambda\neq 0),\\ (\ln y_i)\left(\prod\limits_{i=1}^{n}y_i\right)^{1/n} & (\lambda=0).\end{cases}$$

(2) 利用计算线性回归模型

$$\boldsymbol{z}^{(\lambda)}=\boldsymbol{X\beta}+\boldsymbol{e},\quad E(\boldsymbol{e})=0,\quad \mathrm{cov}(\boldsymbol{e})=\sigma^2\boldsymbol{I}$$

的残差平方和,计算出式(1-27)定义的 $\mathrm{RSS}(\lambda,\boldsymbol{z}^{(\lambda)})$.

(3) 对于一系列的 λ 值,重复上面步骤,得到相应的残差平方和 $\mathrm{RSS}(\lambda, z^{(\lambda)})$ 的一串值. 以 λ 为横坐标, $\mathrm{RSS}(\lambda, z^{(\lambda)})$ 为纵坐标,作出相应的函数图形,用直观方法找出使 $\mathrm{RSS}(\lambda, z^{(\lambda)})$ 达到最小值的 $\hat{\lambda}$.

在求到了 $\hat{\lambda}$ 之后,再利用公式 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(\hat{\lambda})}$ 获得回归系数的最小二乘估计.

关于回归诊断方面的详细讨论,读者可参阅文献[3]的第二章或文献[4].

2 方差分析模型

2.1 模型概论

2.1.1 单因素方差分析模型

假设某种化工产品的强度与生产过程中的反应温度有重要关系. 设可供选择的反应温度有 a 种: $T_1, T_2, \cdots, T_a$. 现在要比较这 a 种温度对产品强度影响的优劣.

现从第 i 种温度下生产的产品中随机抽取 n_i 件样品,测得其中第 j 件产品的强度为 y_{ij}, $i = 1,2,\cdots,a$, $j = 1,2,\cdots,n_i$,那么,可通过分析这些数据来比较这 a 种温度的优劣.

将第 i 种反应温度下生产的产品的强度看成一个均值为 μ_i,方差为 σ^2 的正态总体,于是 $y_{ij} \sim N(\mu_i, \sigma^2)$, $i = 1,2,\cdots,a$, $j = 1,2,\cdots,n_i$,把这些数据列成表 2-1.

表 2-1

反应温度	总　体	样　本
T_1	$N(\mu_1, \sigma^2)$	$y_{11}, y_{12}, \cdots, y_{1n_1}$
T_2	$N(\mu_2, \sigma^2)$	$y_{21}, y_{22}, \cdots, y_{2n_2}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots \quad \vdots \quad \vdots$
T_a	$N(\mu_a, \sigma^2)$	$y_{a1}, y_{a2}, \cdots, y_{an_a}$

这样一来,问题归结为比较这 a 个总体的均值 μ_i. 把 μ_i 分解为 $\mu_i = \mu + \alpha_i$,这里 μ 称为总平均, α_i 称为第 i 种温度的效应. 于是观测值 y_{ij} 可以分解为 $y_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij}$,这里 e_{ij} 为随机误差,假定都服从 $N(0,\sigma^2)$ 且相互独立. 归纳起来,可得到如下模型:

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij}, \quad e_{ij} \sim N(0,\sigma^2) \quad (i = 1,2,\cdots,a, j = 1,2,\cdots,n_i), \tag{2-1}$$

这就是所谓的单因素方差分析模型. 在这里,可以对 α_i 加上约束条件:

$$\sum_{i=1}^{a} n_i \alpha_i = 0.$$

引进矩阵记号：

$$y^{\mathrm{T}} = (y_{11}, y_{12}, \cdots, y_{1n_1}, y_{21}, y_{22}, \cdots, y_{2n_2}, \cdots, y_{a1}, y_{a2}, \cdots, y_{an_a}),$$

$$e^{\mathrm{T}} = (e_{11}, e_{12}, \cdots, e_{1n_1}, e_{21}, e_{22}, \cdots, e_{2n_2}, \cdots, e_{a1}, \cdots, e_{a2}, e_{an_a}),$$

$$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} = (\mu, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_a), \quad \boldsymbol{h}^{\mathrm{T}} = (0, n_1, n_2, \cdots, n_a),$$

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & & & \\ 1 & 1 & & & \\ 1 & & 1 & & \\ \vdots & & \vdots & & \\ 1 & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ 1 & & & & 1 \\ \vdots & & & & \vdots \\ 1 & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} \left.\begin{matrix} \\ \\ \\ \end{matrix}\right\} n_1 \text{ 行} \\ \left.\begin{matrix} \\ \\ \\ \end{matrix}\right\} n_2 \text{ 行} \\ \vdots \\ \left.\begin{matrix} \\ \\ \\ \end{matrix}\right\} n_a \text{ 行} \end{matrix}$$

上面的模型式(2-1)和约束条件可写成如下简洁形式：

$$\begin{cases} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{e} \qquad (\boldsymbol{e} \sim N(\boldsymbol{0}, \sigma^2 \boldsymbol{I})); \\ \boldsymbol{h}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta} = 0. \end{cases} \tag{2-2}$$

在方差分析中，把“反应温度”称为一个因素，把不同的温度 $T_1, T_2, \cdots, T_a$ 称为该因素的水平，而 α_i 就是第 i 个水平的效应．除了约束条件 $\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta} = 0$ 之外，模型式(2-2)和正态线性回归模型有完全相同的形式．但不同的是设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的元素值不同．对于线性回归模型，它的设计矩阵是回归自变量的取值，一般说来它可以取任意连续值．但对于方差分析模型，$\boldsymbol{X}$ 的元素只能取 0 和 1 两个值，它刻画了在对应的观测或试验中，因素的某个水平的效应存在与否．这种情况的后果是设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的秩为 a，它小于 $\boldsymbol{X}$ 的列数 $a+1$.

2.1.2 两因素方差分析的可加模型

在上面的例子中，如果除了反应温度之外，反应压力也是影响产品强度的一个重要因素，那么，就有“反应温度”和“反应压力”两个因素．这就产生了两因素方差分析问题．

假设有 b 种反应压力 $P_1, P_2, \cdots, P_b$ 需要进行比较．现从第 i 种反应温度和第 j 种反应压力生产出的产品中随机抽取 c 件，测出它们的强度．记 y_{ijk} 为在第 i 种反应温度第 j 种反应压力下生产出的产品样品中第 k 件的强度．类似于单因素方差分析，可以认为 $y_{ijk}(k = 1, 2, \cdots, c)$ 为来自均值为 μ_{ij}，方差为 σ^2 的正态总体 $N(\mu_{ij}, \sigma^2)$ 的一组随机样本．将 μ_{ij} 作分解：

$$\mu_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j,$$

其中 μ 为总平均，α_i 为第 i 种反应温度的效应，β_j 为第 j 种反应压力的效应．可以对它们加上两个约束条件：

$$\sum_{i=1}^{a}\alpha_i = 0, \quad \sum_{j=1}^{b}\beta_j = 0.$$

于是对于 y_{ijk}，有分解式：

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + e_{ijk},$$

其中 e_{ijk} 为随机误差，假定都服从 $N(0,\sigma^2)$，且相互独立．归纳起来，得到如下两因素方差分析的可加模型：

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + e_{ijk}, \quad (e_{ijk} \sim N(0,\sigma^2)), \tag{2-3}$$

$$\sum_{i=1}^{a}\alpha_i = 0, \ \sum_{j=1}^{b}\beta_j = 0 \quad (i = 1,2,\cdots,a, j = 1,2,\cdots,b, k = 1,2,\cdots,c).$$

引进矩阵记号：

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} = (y_{111}, y_{112}, y_{122}, \cdots, y_{11c}, y_{121}, \cdots, y_{12c}, \cdots, y_{ab1}, y_{ab2}, \cdots, y_{abc}),$$

$$\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}} = (e_{111}, e_{112}, e_{122}, \cdots, e_{11c}, e_{121}, \cdots, e_{12c}, \cdots, e_{ab1}, e_{ab2}, \cdots, e_{abc}),$$

$$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} = (\mu, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_a, \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_b),$$

$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix}
\mathbf{1} & \mathbf{1} & & & & \mathbf{1} & & & \\
\vdots & \vdots & & & & & \ddots & & \\
\mathbf{1} & \mathbf{1} & & & & & & & \mathbf{1} \\
\mathbf{1} & & \mathbf{1} & & & \mathbf{1} & & & \\
\vdots & & \vdots & & & & \ddots & & \\
\mathbf{1} & & \mathbf{1} & & & & & & \mathbf{1} \\
\vdots & & & \ddots & & & & \vdots & \\
\mathbf{1} & & & & \mathbf{1} & \mathbf{1} & & & \\
\vdots & & & & \vdots & & \ddots & & \\
\mathbf{1} & & & & \mathbf{1} & & & & \mathbf{1}
\end{bmatrix},$$

其中 $\mathbf{1}$ 为 $c \times 1$ 的向量．上面的模型和约束条件变为：

$$\begin{cases} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{x\beta} + \boldsymbol{e} & (\boldsymbol{e} \sim N(\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{I})); \\ \boldsymbol{H\beta} = 0. \end{cases} \tag{2-4}$$

从式(2-2)和式(2-4)可以看出，除了约束条件外，单因素和两因素方差分析模型在形式上和线性回归模型没有什么不同．事实上，其他一些方差分析模型也可以表成这样的形式．方差分析模型和线性回归模型在本质上不同的是设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的秩．对于线性回归模型，$\boldsymbol{X}$ 的秩等于它的列数；而对于方差分析模型，$\boldsymbol{X}$ 的秩总是小于它的列数．

2.2　单因素方差分析模型

2.2.1　对照的估计

对于单因素方差分析模型式(2-2)，应用最小二乘法先求无约束的最小二乘估计，这时正则方程 $X^TX\beta = X^Ty$ 具有如下特殊形式：

$$\begin{cases} n\mu + \sum_i n_i\alpha_i = y_{..}, \\ n_i\mu + n_i\alpha_i = y_{i.} \qquad (i = 1,2,\cdots,a), \end{cases} \tag{2-5}$$

其中

$$y_{..} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i} y_{ij}, \quad y_{i.} = \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij},$$

$$n = \sum_{i=1}^{a} n_i.$$

添加上约束条件 $\sum_{i=1}^{a} n_i\alpha_i = 0$，容易得到式(2-5)的一组解：

$$\begin{cases} \hat{\mu} = \bar{y}_{..}, \\ \hat{\alpha}_i = \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..}, \end{cases} \tag{2-6}$$

其中

$$\bar{y}_{i.} = y_{i.}/n_i,$$
$$\bar{y}_{..} = y_{..}/n.$$

对于效应 α_i 的线性组合 $\sum_{i=1}^{a} c_i\alpha_i$，若系数 c_i 满足 $\sum_{i=1}^{a} c_i = 0$，则称 $\sum_{i=1}^{a} c_i\alpha_i$ 为一个**对照**.

如果 $\sum_{i=1}^{a} c_i\alpha_i$ 为一个对照，则 $\sum_{i=1}^{a} c_i\hat{\alpha}_i$ 是它的唯一最佳线性无偏估计.

2.2.2　假设检验

对于一般单因素方差分析模型式(2-2)，所研究的因素可称为因素 A，它的 a 个水平记为 $A_1, A_2, \cdots, A_a$. 考察这 a 个水平的效应是否有显著差异，即检验假设

$$H_0: \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_a,$$

等价于检验假设

$$H_0: \alpha_1 - \alpha_a = \alpha_2 - \alpha_a = \cdots = \alpha_{a-1} - \alpha_a = 0.$$

应用式(1-16)可得到检验统计量

$$F_0=\frac{\frac{1}{a-1}SS_A}{\frac{1}{n-a}SS_e}.$$

其中

$$SS_A=\sum_{i=1}^{a}n_i(\overline{y}_{i.}-y_{..})^2,$$

$$SS_e=\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i}(y_{ij}-\overline{y}_{i.})^2,$$

分别称为因素 A 的平方和和误差平方和．当 H_0 成立时，$F_0\sim F_{a-1,n-a}$．于是对于给定的水平 α，当 $F_0>F_{a-1,n-a}(\alpha)$ 时，拒绝原假设 H_0，即认为因素 A 的 a 个水平的效应有显著差异．当 $F_0\leqslant F_{a-1,n-a}(\alpha)$ 时，接受原假设 H_0，即认为因素 A 的 a 个水平的效应没有显著差异．

有关计算结果可列成一个表格，称为方差分析表，如表 2-2 所示．其中表的最后一列为自由度为 $a-1,n-a$ 的 F 分布随机变量取值大于 F_0 的概率．显然这个概率小于 α，等价于 $F_0>F_{a-1,n-a}(\alpha)$．现在许多统计软件的输出结果都有这个概率值．有了它，在实际工作中就省去了查 F 分布表的麻烦．

表 2-2

方差源	自由度	平方和	均方	F 值	$P(F_{a-1,n-a}>F_0)$
因素 A	$a-1$	SS_A	$MS_A=\frac{SS_A}{a-1}$	$F_0=\frac{MS_A}{MS_e}$	
误差	$n-a$	SS_e	$MS_e=\frac{SS_e}{n-a}$		
总和	$n-1$				

2.2.3　同时置信区间

1. 邦菲洛尼同时置信区间

对于任意 m 个对照 $\sum_{i=1}^{a}c_i^{(k)}\alpha_i,k=1,2,\cdots,m$，置信系数为 $1-\alpha$ 的邦菲洛尼同时置信区间为

$$\sum_{i=1}^{a}c_i^{(k)}\overline{y}_i\pm t_{n-a}\left(\frac{\alpha}{2m}\right)\hat{\sigma}\left(\sum_{i=1}^{a}\frac{c_i^{(k)}}{n_i}\right)^{1/2}\qquad(k=1,2,\cdots,m),$$

其中

$$\hat{\sigma}^2=\frac{SS_e}{n-a}.$$

特别地,对于 m 个形如 $\alpha_i - \alpha_j$ 的对照,这些区间为

$$(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{j\cdot}) \pm t_{n-a}\left(\frac{\alpha}{2m}\right)\hat{\sigma}\left(\frac{1}{n_i} + \frac{1}{n_j}\right)^{1/2}.$$

2. 谢菲同时置信区间

对于所有对照 $\sum_{i=1}^{a} c_i\alpha_i$,置信系数为 $1-\alpha$ 的谢菲同时置信区间为

$$\sum_i c_i\bar{y}_{i\cdot} \pm ((a-1)F_{a-1,n-a}(\alpha))^{1/2}\hat{\sigma}\left(\sum_i \frac{c_i^2}{n_i}\right)^{1/2}.$$

2.3 两因素方差分析模型

2.3.1 对照的估计

为了符号简单计,在两因素方差分析可加模型式(2-4)中,设 $c=1$.应用最小二乘法求无约束的最小二乘估计,这时正则方程 $X^{\mathrm{T}}X\beta = X^{\mathrm{T}}y$ 具有如下特殊形式:

$$\begin{cases} ab\mu + b\sum_i \alpha_i + a\sum_j \beta_j = y_{\cdot\cdot}, \\ b\mu + b\alpha_i + \sum_j \beta_j = y_{i\cdot} \qquad (i=1,2,\cdots,a), \\ a\mu + \sum_i \alpha_i + a\beta_j = y_{\cdot j} \qquad (j=1,2,\cdots,b), \end{cases} \tag{2-7}$$

其中

$$y_{\cdot\cdot} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b} y_{ij}; \quad y_{i\cdot} = \sum_{j=1}^{b} y_{ij}; \quad y_{\cdot j} = \sum_{i=1}^{a} y_{ij}.$$

再利用约束条件 $\sum_{i=1}^{a}\alpha_i = 0, \sum_{j=1}^{b}\beta_j = 0$,容易得到方程组式(2-7)的一组解:

$$\hat{\mu} = \bar{y}_{\cdot\cdot},$$
$$\hat{\alpha}_i = \bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot} \qquad (i=1,2,\cdots,a),$$
$$\hat{\beta}_j = \bar{y}_{\cdot j} - \bar{y}_{\cdot\cdot} \qquad (j=1,2,\cdots,b),$$

其中

$$\bar{y}_{\cdot\cdot} = \frac{y_{\cdot\cdot}}{ab}, \quad \bar{y}_{i\cdot} = \frac{y_{i\cdot}}{b}, \bar{y}_{\cdot j} = \frac{y_{\cdot j}}{a}.$$

和单因素方差分析相类似,对于效应 α_i 的线性组合 $\sum_{i=1}^{a} c_i\alpha_i$,当 $\sum_{i=1}^{a} c_i = 0$ 时,称其为一个对照.类似地,如果 $\sum_{j=1}^{b} d_j = 0$,称 $\sum_{j=1}^{b} d_j\beta_j = 0$ 为一个对照.

如果 $\sum_{i=1}^{a} c_i\alpha_i$ 为对照,则 $\sum_{i=1}^{a} c_i\hat{\alpha}_i$ 为其唯一最佳线性无偏估计.

类似地,若$\sum_{j=1}^{b} d_j \beta_j$为一对照,则$\sum_{j=1}^{b} d_j \widehat{\beta}_j$为其唯一最佳线性无偏估计.

2.3.2　假设检验

对于两因素方差分析模型式(2-4),所研究的两个因素分别称为因素A和B. 假设检验的内容主要有两个:其一是检验

$$H_1: \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_a,$$

即因素A的a个水平效应无差异;其二是检验

$$H_2: \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_b,$$

即因素B的b个水平效应无差异,应用式(1-16)可得到检验H_1的统计量

$$F_1 = \frac{\dfrac{\mathrm{SS}_A}{a-1}}{\dfrac{\mathrm{SS}_e}{(a-1)(b-1)}},$$

其中

$$\mathrm{SS}_A = b\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2,$$

$$\mathrm{SS}_e = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij} - \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{.j} + \bar{y}_{..})^2.$$

称SS_A为因素A的平方和,SS_e为误差平方和. 当H_1成立时,$F_1 \sim F_{a-1,(a-1)(b-1)}$. 对于给定的水平$\alpha$,当$F_1 > F_{a-1,(a-1)(b-1)}(\alpha)$时,拒绝$H_1$.

类似地,应用式(1-16)可得到检验H_2的统计量

$$F_2 = \frac{\dfrac{\mathrm{SS}_B}{b-1}}{\dfrac{\mathrm{SS}_e}{(a-1)(b-1)}},$$

其中

$$\mathrm{SS}_B = a\sum_{j=1}^{b}(\bar{y}_{.j} - \bar{y}_{..})^2,$$

称为因素B的平方和. 当H_2成立时,$F_2 \sim F_{b-1,(a-1)(b-1)}$. 对于给定的水平$\alpha$,当$F_2 > F_{b-1,(a-1)(b-1)}(\alpha)$时,拒绝$H_2$.

将上述计算结果列成方差分析表,如表2-3所示. 其中$P(F_{a-1,(a-1)(b-1)} > F_1)$是自由度为$a-1,(a-1)(b-1)$的$F$分布随机变量大于$F_1$的概率. 显然,这个概率小于$\alpha$等价于$F_1 > F_{a-1,(a-1)(b-1)}(\alpha)$. 对于因素$B$,概率$P(F_{b-1,(a-1)(b-1)} > F_2)$的意义完全类似. 现在许多统计软件的输出结果都有这两个概率值.

表 2-3

方差源	自由度	平方和	均 方	F 值	概 率
因素 A	$a-1$	SS_A	$MS_A=\frac{SS_A}{a-1}$	$F_1=\frac{MS_A}{MS_e}$	$P(F_{a-1,(a-1)(b-1)}>F_1)$
因素 B	$b-1$	SS_B	$MS_B=\frac{SS_B}{b-1}$	$F_2=\frac{MS_B}{MS_e}$	$P(F_{b-1,(a-1)(b-1)}>F_2)$
误差	$(a-1)\times(b-1)$	SS_e	$MS_e=\frac{SS_e}{(a-1)(b-1)}$		
总和	$ab-1$				

2.3.3 同时置信区间

1. 邦非洛尼同时置信区间

对于因素 A,任意 m 个对照 $\alpha_i-\alpha_j$ 的置信系数为 $1-\alpha$ 的邦非洛尼同时置信区间为

$$(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{j\cdot})\pm t_{(a-1)(b-1)}\left(\frac{\alpha}{2m}\right)\hat{\sigma}\left(\frac{2}{b}\right)^{1/2}.$$

类似地,对于因素 B,任意 m 个对照 $\beta_i-\beta_j$ 的置信系数为 $1-\alpha$ 的邦非洛尼同时置信区间为

$$(\bar{y}_{\cdot i}-\bar{y}_{\cdot j})\pm t_{(a-1)(b-1)}\left(\frac{\alpha}{2m}\right)\hat{\sigma}\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2},$$

其中

$$\hat{\sigma}^2=MS_e=\frac{SS_e}{(a-1)(b-1)}.$$

2. 谢非同时置信区间

对于因素 A,所有形如 $\alpha_i-\alpha_j$ 的对照的置信系数为 $1-\alpha$ 的同时置信区间为

$$(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{j\cdot})\pm((a-1)F_{a-1,(a-1)(b-1)}(\alpha))^{1/2}\hat{\sigma}\left(\frac{2}{b}\right)^{1/2}.$$

对于因素 B,所有形如 $\beta_i-\beta_j$ 的对照的置信系数为 $1-\alpha$ 的谢非同时置信区间为

$$(\bar{y}_{\cdot i}-\bar{y}_{\cdot j})\pm((b-1)F_{a-1,(a-1)(b-1)}(\alpha))^{1/2}\hat{\sigma}\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}.$$

2.4 套分类模型

2.4.1 套分类模型

在一些两因素的试验中,并不是两因素 A 和 B 的所有水平都是可以相遇的.往

往往出现对因素 A 的每个水平 A_i，因素 B 有对应的水平．例如在化工试验中，要比较甲、乙两种催化剂，同时还要选择每种催化剂所适用的温度，往往不同的催化剂所要求的温度不同．把催化剂称为因素 A，它有两个水平 A_1 和 A_2，分别对应甲、乙两种催化剂．把温度称为因素 B．假定对于催化剂甲，即 A_1，可供试验选择的温度为 200℃，220℃ 和 240℃，它们就是对应于 A_1 的因素 B 的三个水平，分别记为 $B_{1(1)}$，$B_{2(1)}$ 和 $B_{3(1)}$．而对于催化剂乙，即 A_2，可供试验选择的温度为 150℃，170℃ 和 190℃，它们就是对应于 A_2 的因素 B 的三个水平，分别记为 $B_{1(2)}$，$B_{2(2)}$ 和 $B_{3(2)}$．把催化剂称为一级因素，温度称为二级因素．二级因素是套在一级因素里面的．这样的设计称为套设计，对应的模型称为套模型．

一般地，假设因素 A 有 a 个水平 $A_1,A_2,\cdots,A_a$．对于 A_i，因素 B 有 b_i 个水平，记为 $B_{1(i)},B_{2(i)},\cdots,B_{b_i(i)}$．用 y_{ijk} 表示在水平组合 A_i 和 $B_{j(i)}$ 下的第 k 个观测值，则两因素套分类模型可表为：

$$y_{ijk}=\mu+\alpha_i+\beta_{j(i)}+e_{ijk},\quad e_{ijk}\sim N(0,\sigma^2) \tag{2-8}$$
$$(i=1,2,\cdots,a;j=1,2,\cdots,b_i;k=1,2,\cdots,n_{ij}),$$

其中 μ 为总平均；α_i 为水平 A_i 的效应；$\beta_{j(i)}$ 为水平 $B_{j(i)}$ 的效应；e_{ijk} 为随机误差，且相互独立．和前面两节一样引进适当矩阵记号，可以把这个模型表成类似式(2-2)和式(2-4)的形式．这里不再赘述．

2.4.2 估计问题

应用最小二乘法求模型式(2-8)诸参数的最小二乘估计．这时正则方程 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 具有如下特殊形式(这里假设 $b_i=b,n_{ij}=c$)：

$$abc\mu+bc\sum_{i=1}^{a}\alpha_i+c\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\beta_{j(i)}=y_{\cdots},$$
$$bc\mu+bc\alpha_i+c\sum_{j=1}^{b}\beta_{j(i)}=y_{i\cdot\cdot},$$
$$c\mu+c\alpha_i+c\beta_{j(i)}=y_{ij\cdot},$$

其中 $y_{\cdots},y_{i\cdot\cdot},y_{ij\cdot}$ 的含义与式(2-7)的相同．不失一般性地可加上如下约束条件：

$$\sum_{i=1}^{a}\alpha_i=0,$$
$$\sum_{j=1}^{b}\beta_{j(i)}=0.$$

这样很容易得到正则方程的一组解：

$$\hat{\mu}=\bar{y}_{\cdots},$$
$$\hat{\alpha}_i=\bar{y}_{i\cdot\cdot}-\bar{y}_{\cdots},$$
$$\hat{\beta}_{j(i)}=\bar{y}_{ij\cdot}-\bar{y}_{i\cdot\cdot}.$$

对两因素套分类模型，下面两类参数函数往往是试验者最关心的：

(1) $\beta_{j(i)}-\beta_{k(i)},j\neq k,i=1,2,\cdots,a$．它是在水平 A_i 下因素 B 的两个水平 B_j

和 B_k 效应之差. 它的最佳线性无偏估计为 $\hat{\beta}_{j(i)} - \hat{\beta}_{k(i)}$,即 $\bar{y}_{ij\cdot} - \bar{y}_{ik\cdot}$.

(2)$\alpha_i - \alpha_k, i \neq k$. 很明显,它是因素 A 的两个水平 A_i 和 A_k 的效应之差. 它的最佳线性无偏估计为 $\bar{y}_{i\cdot\cdot} - \bar{y}_{k\cdot\cdot}$.

2.4.3　假设检验

最感兴趣的是检验二级因素诸水平效应是否相等,即检验假设

$$H:\beta_{1(i)} = \beta_{2(i)} = \cdots = \beta_{b(i)} = 0 \qquad (i = 1,2,\cdots,a).$$

应用式(1-16),可得检验统计量

$$F = \frac{\frac{1}{a(b-1)}SS_H}{\frac{1}{ab(c-1)}SS_e},$$

其中

$$SS_H = c\sum_i\sum_j(\bar{y}_{ij\cdot} - \bar{y}_{i\cdot\cdot})^2,$$

$$SS_e = \sum_i\sum_j\sum_k(y_{ijk} - \bar{y}_{ij\cdot})^2.$$

当 H 成立时,$F \sim F_{a(b-1),ab(c-1)}$. 于是当 $F > F_{a(b-1),ab(c-1)}(\alpha)$ 时,拒绝假设 H;不然,接受 H.

2.4.4　同时置信区间

1. 邦非洛尼同时置信区间

对于任意固定的 i,任意 m 个形如 $\beta_{j(i)} - \beta_{k(i)}$ 的对照的置信系数为 $1-\alpha$ 的邦菲洛尼同时置信区间为

$$(\bar{y}_{ij\cdot} - \bar{y}_{ik\cdot}) \pm t_{ab(c-1)}\left(\frac{\alpha}{2m}\right)\hat{\sigma}\left(\frac{2}{c}\right)^{1/2},$$

其中

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{SS_e}{ab(c-1)}.$$

2. 谢非同时置信区间

对于任意固定的 i,所有形如 $\beta_{j(i)} - \beta_{k(i)}$ 的对照的置信系数为 $1-\alpha$ 的谢非同时置信区间为

$$(\bar{y}_{ij\cdot} - \bar{y}_{ik\cdot}) \pm (a(b-1)F_{a(b-1),ab(c-1)}(\alpha))^{1/2}\hat{\sigma}\left(\frac{2}{c}\right)^{1/2}.$$

3 混合模型

3.1 模型概论

3.1.1 线性模型的分类

线性模型可以分为三大类:**固定效应模型**、**随机效应**模型和**混合模型**.这种分类是依据线性模型 $y = X\beta + e$ 中,参数向量 β 的分量是固定的(即非随机的)、随机的或二者皆有来决定的.前面两章讨论的线性回归模型和方差分析模型都是固定效应模型.本章讨论混合模型,实际上也包括了随机模型,因为随机模型可以看作在参数向量 β 的诸分量中除常数项外都是随机变量的一种特殊的混合模型.

3.1.2 混合模型的一般形式

混合模型的一般形式为

$$y = X\beta + Z\gamma + e, \tag{3-1}$$

其中 X 和 Z 分别为 $n \times p$ 和 $n \times q$ 已知设计矩阵,β 为 $p \times 1$ 未知固定效应向量(即非随机参数向量),γ 为 $q \times 1$ 随机效应向量,e 为 $n \times 1$ 随机误差.它们满足

$$E(\gamma) = 0, \quad \mathrm{cov}(\gamma) = D, \quad \mathrm{cov}(\gamma, e) = 0, \quad \mathrm{cov}(e) = R,$$

其中 D 和 R 分别为 $q \times q$ 和 $n \times n$ 正定矩阵.于是

$$E(y) = X\beta, \quad \mathrm{cov}(y) = ZDZ^{\mathrm{T}} + R \stackrel{\mathrm{def}}{=\!=} V.$$

若记 $u = Z\gamma + e$,式(3-1)也可以写成如下形式:

$$y = X\beta + u, \quad E(u) = 0, \quad \mathrm{cov}(u) = V. \tag{3-2}$$

3.1.3 混合模型的特殊形式——方差分量模型

在模型式(3-1)中,将 Z 分块为

$$Z = (Z_1, Z_2, \cdots, Z_k), \quad \gamma = (\gamma_1^{\mathrm{T}}, \gamma_2^{\mathrm{T}}, \cdots, \gamma_k^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}},$$

其中 Z_i 为 $n \times q$ 矩阵,γ_i 为 $q_i \times 1$ 矩阵,且 $q = \sum_{i=1}^{k} q_i$,则模型式(3-1)变形为

$$y = X\beta + Z_1\gamma_1 + Z_2\gamma_2 + \cdots + Z_k\gamma_k + e. \tag{3-3}$$

若假设

$$\begin{aligned}
&\mathrm{cov}(\gamma_i) = \sigma_i^2 I_q \qquad (i = 1,2,\cdots,k),\\
&\mathrm{cov}(e) = \sigma^2 I_n,\\
&\mathrm{cov}(\gamma_i, \gamma_j) = 0 \qquad (i \neq j),\\
&\mathrm{cov}(\gamma_i, e) = 0,
\end{aligned}$$

则有

$$\begin{cases} E(y) = X\beta, \\ \mathrm{cov}(y) = \sigma_1^2 Z_1 Z_1^{\mathrm{T}} + \sigma_2^2 Z_2 Z_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \sigma_k^2 Z_k Z_k^{\mathrm{T}} + \sigma^2 I_n \xlongequal{\text{def}} V. \end{cases} \tag{3-4}$$

在这个模型中，$\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_k^2$ 称为方差分量，σ^2 称为误差方差．有时为叙述方便，也把它们统称为**方差分量**，模型式(3-4)也称为**方差分量模型**．

3.2 固定效应的估计和随机效应的预测

3.2.1 固定效应的估计

在模型式(3-1)中，若 V 已知，则从高斯－马尔可夫定理知，任意线性函数 $c^{\mathrm{T}}\beta$ 的最佳线性无偏估计为 $c^{\mathrm{T}}\beta^*$，其中

$$\beta^* = (X^{\mathrm{T}}V^{-1}X)^{-1}X^{\mathrm{T}}V^{-1}y. \tag{3-5}$$

当然，当逆矩阵 $(X^{\mathrm{T}}V^{-1}X)^{-1}$ 不存在时，可用广义逆矩阵 $(X^{\mathrm{T}}V^{-1}X)^{-}$ 来代替，这时只有一部分线性函数 $c^{\mathrm{T}}\beta$（称为可估函数），它们的最佳线性无偏估计为 $c^{\mathrm{T}}\beta^*$．一般说来，V 是未知的．这时最常用的做法是，先对 V 作出估计 $\hat{V}$，然后在式(3-5)中用 $\hat{V}$ 代替 V，得到新的估计 $c^{\mathrm{T}}\hat{\beta}$，这里

$$\hat{\beta} = (X^{\mathrm{T}}\hat{V}^{-1}X)^{-1}X^{\mathrm{T}}\hat{V}^{-1}y. \tag{3-6}$$

这种估计称为两步估计．

3.2.2 随机效应的预测

考虑随机效应的线性组合 $\lambda^{\mathrm{T}}\gamma$．在模型式(3-1)中如果 R 和 D 都已知，则 $\lambda^{\mathrm{T}}\gamma$ 的最佳线性无偏预测为

$$d^{\mathrm{T}}(y - X\beta^*),$$

其中 β^* 由式(3-5)所定义，d 为方程

$$Vd = ZD\lambda$$

的解．即 $\lambda^{\mathrm{T}}\gamma$ 的最佳线性无偏预测为 $\lambda^{\mathrm{T}}\gamma^*$，这里

$$\gamma^* = DZ^{\mathrm{T}}V^{-1}(y - X\beta^*). \tag{3-7}$$

和固定效应的情形相类似，当 R 和 D 未知时，先求出它们的估计 $\hat{R}$ 和 $\hat{D}$，从而得到 V 的估计 $\hat{V}$，代入上式得到

$$\tilde{\gamma} = \hat{D}Z^{\mathrm{T}}\hat{V}^{-1}(y - X\hat{\beta}),$$

最后得到 $\lambda^{\mathrm{T}}\gamma$ 的一种预测 $\lambda^{\mathrm{T}}\tilde{\gamma}$．

3.3 混合模型方程

混合模型方程的作用完全类似于固定效应模型的正则方程．从它可以同时得

到最佳线性无偏估计和最佳线性无偏预测.

对于混合模型式(3-1),若 $\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{R}$ 可逆,则混合模型方程定义为

$$\begin{bmatrix} X^{\mathrm T}R^{-1}X & X^{\mathrm T}R^{-1}Z \\ Z^{\mathrm T}R^{-1}X & D^{-1}+Z^{\mathrm T}R^{-1}Z \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta\\ \gamma\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}X^{\mathrm T}R^{-1}y\\ Z^{\mathrm T}R^{-1}y\end{bmatrix}, \tag{3-8}$$

它的解即为式(3-5)和式(3-7)所定义的 $\boldsymbol{\beta}^*$ 和 $\boldsymbol{\gamma}^*$.

混合模型方程的优点是便于计算.例如,为了求 $\boldsymbol{\beta}^*$,也可以通过求解方程 $X^{\mathrm T}V^{-1}X\beta = X^{\mathrm T}V^{-1}y$ 来求,但这里需要求 $n\times n$ 的矩阵 V 的逆矩阵,而对于混合模型方程,只要求 D^{-1} 和 R^{-1} 即可.前者的阶数是随机效应的个数 q,而后者往往因为 R 是对角矩阵而非常简单.

混合模型方程的另一种等价形式为:

$$\begin{bmatrix} X^{\mathrm T}R^{-1}X & X^{\mathrm T}R^{-1}ZD \\ Z^{\mathrm T}R^{-1}X & I+Z^{\mathrm T}R^{-1}ZD \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta\\ \eta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}X^{\mathrm T}R^{-1}y\\ Z^{\mathrm T}R^{-1}y\end{bmatrix},$$

解得 $\boldsymbol{\beta}^*$ 和 $\boldsymbol{\eta}^*$,然后利用关系 $\gamma^* = D\eta^*$ 求得 γ^*.这个方程的好处是它不要求 D 可逆.当 D 可逆时,它和式(3-8)等价.

3.4 方差分量的估计

本节讨论方差分量模型式(3-3)或式(3-4)的方差分量的几种常用估计.

3.4.1 极大似然估计

设 $\gamma_i \sim N(0,\sigma_i^2 I_{g_i}), i = 1,2,\cdots,k, e \sim N(0,\sigma_0^2 I_n)$,且相互独立,则似然方程为

$$\begin{cases} X^{\mathrm T}V^{-1}X\beta = X^{\mathrm T}V^{-1}y, \\ \operatorname{tr} Z_i^{\mathrm T}V^{-1}Z_i = (y-X\beta)^{\mathrm T}V^{-1}Z_iZ_i^{\mathrm T}V^{-1}(y-X\beta) \qquad (i=0,1,\cdots,k), \end{cases}$$

其中 $Z_0 = I_n, V=\sum_{i=0}^{k}\sigma_i^2 Z_iZ_i^{\mathrm T}$, $\operatorname{tr}(\cdot)$ 表示矩阵的迹.

上面的似然方程需要用迭代方法求解.如果求到的解都满足 $\sigma_i^2>0$,则所求到的就是方差分量的极大似然估计.但也可能有些分量不满足 $\sigma_i^2>0$ 的要求,这时通常采用的处理方法是取估计为 $\sigma_i^{*2} = \max\{0,\widehat{\sigma}_i^2\}$.

3.4.2 限制极大似然估计

限制极大似然估计是基于残差向量 Ny 的分布求得的方差分量的估计,这里

$$N = I - X(X^{\mathrm T}V^{-1}X)^{-}X^{\mathrm T}V^{-1},$$

其中 A^- 表示 A 的一个广义逆矩阵.似然方程为

$$\sum_{j=0}^{k}\sigma_j^2\operatorname{tr}[Z_jZ_j^{\mathrm T}V^{-1}NZ_iZ_i^{\mathrm T}V^{-1}N] = y^{\mathrm T}N^{\mathrm T}V^{-1}Z_iZ_i^{\mathrm T}V^{-1}Ny \quad (i=0,1,2,\cdots,k), \tag{3-9}$$

其中

$$V=\sum_{i=0}^{k}\sigma_i^2 Z_i Z_i^{\mathrm{T}},$$
$$Z_0=I_n.$$

上述方程需要用迭代法求解．

3.4.3　最小范数二次无偏估计

最小范数二次无偏估计(minimum norm quadratic unbiased estimation)常简称为MINQUE．若记 $\boldsymbol{\sigma}^2=(\sigma_0^2,\sigma_1^2,\sigma_2^2,\cdots,\sigma_k^2)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{c}=(c_0,c_1,c_2,\cdots,c_k)^{\mathrm{T}}$ 为已知向量，则 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\sigma}^2$ 的 MINQUE 是指在二次估计类 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}$ 中具有下列性质的估计：

1° 不变性　即对于任意 $\boldsymbol{\xi}$，

$$(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{X}\boldsymbol{\xi})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{X}\boldsymbol{\xi})=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}.$$

2° 无偏性

$$E(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y})=\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\sigma}^2.$$

3° 最小范数　如果 $\boldsymbol{e}$ 和 $q_i\times 1$ 的随机向量 $\boldsymbol{\gamma}_i$ 都已知，则 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\sigma}^2$ 的一个自然的估计是

$$c_0\left(\frac{\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}}{n}\right)+c_1\left(\frac{\boldsymbol{\gamma}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\gamma}_1}{q_1}\right)+\cdots+c_k\left(\frac{\boldsymbol{\gamma}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\gamma}_k}{q_k}\right)\overset{\text{def}}{=\!=}\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\eta},$$

其中

$$\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\gamma}_1^{\mathrm{T}},\cdots,\boldsymbol{\gamma}_k^{\mathrm{T}}),$$

$$\boldsymbol{\Delta}=\mathrm{diag}\left(\frac{c_0}{n}\boldsymbol{I}_n,\frac{c_1}{q_1}\boldsymbol{I}_{q_1},\cdots,\frac{c_k}{q_k}\boldsymbol{I}_{q_k}\right).$$

若 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}$ 具有不变性，则必有

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\eta},$$

其中 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{Z}\mid\boldsymbol{I}_n)$．在满足不变性和无偏性的估计中，最好的估计应使 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}$ 与 $\boldsymbol{\Delta}$ 的范数之差达到最小，即有极小化 $\|\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}-\boldsymbol{\Delta}\|$．这就是所谓范数最小性．

对于任意的 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\sigma}^2$，它的 MINQUE 为 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\sigma}^2}$，其中 $\widehat{\boldsymbol{\sigma}^2}$ 为下面方程组的解：

$$\sum_{j=0}^{k}\sigma_j^2\mathrm{tr}[Z_jZ_j^{\mathrm{T}}V_w^{-1}N_wZ_iZ_i^{\mathrm{T}}V_w^{-1}N_w]$$
$$=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}N_w^{\mathrm{T}}V_w^{-1}Z_iZ_i^{\mathrm{T}}V_w^{-1}N_w\boldsymbol{y}\qquad(i=0,1,2,\cdots,k),\qquad(3\text{-}10)$$

其中

$$V_w=\sum_{i=0}^{k}w_iZ_iZ_i^{\mathrm{T}},\qquad Z_0=I_n,$$
$$N_w=I-X(X^{\mathrm{T}}V_w^{-1}X)^{-}X^{\mathrm{T}}V_w^{-1}.$$

这里 $w_i(i=0,1,2,\cdots,k)$ 是一组可选取的权．

比较式(3-9)和式(3-10)可看到，除了 V_w 和 V，N_w 和 N 之外，这两个方程完全一样，所以当 $V_w=V$，$N_w=N$ 时，MINQUE 就是限制极大似然估计．

在 MINQUE 法中，一个问题是权 w_i 的选取．几种常用的选法是：

(1) $w_i = 1 \quad (i = 0,1,2,\cdots,k)$.

(2) $w_1 = 1;\quad w_i = 0 \quad (i > 1)$.

3.4.4　*方差分析法*

估计方差分量的方差分析法可归纳如下．

(1) 先将随机效应看做固定效应，按通常方差分析方法算出各效应的平方和．

(2) 求这些平方和的均值(此时随机效应不再视为固定效应)，它们是方差分量的线性函数．

(3) 令这些平方和等于它们各自的均值，得到关于方差分量的一个线性方程组．解这个方程组，便得到方差分量的估计，称为方差分析估计．

现在以含三个方差分量的混合模型为例，对上面的方法加以说明．考虑模型

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{Z}_1\boldsymbol{\gamma}_1 + \boldsymbol{Z}_2\boldsymbol{\gamma}_2 + \boldsymbol{e}, \tag{3-11}$$

其中 $E(\boldsymbol{\gamma}_i) = 0, i = 1,2; E(\boldsymbol{e}) = 0; \mathrm{cov}(\boldsymbol{e}) = \sigma_0^2\boldsymbol{I}_n; \mathrm{cov}(\boldsymbol{\gamma}_i) = \sigma_i^2\boldsymbol{I}_{q_i}, i = 1,2$，且 $\boldsymbol{\gamma}_1, \boldsymbol{\gamma}_2$ 和 $\boldsymbol{e}$ 互不相关，所以，

$$\mathrm{cov}(\boldsymbol{y}) = \sigma_1^2\boldsymbol{Z}_1\boldsymbol{Z}_1^{\mathrm{T}} + \sigma_2^2\boldsymbol{Z}_2\boldsymbol{Z}_2^{\mathrm{T}} + \sigma_0^2\boldsymbol{I}_n.$$

第一步　视 $\boldsymbol{\gamma}_1$ 和 $\boldsymbol{\gamma}_2$ 为固定效应，由式(3-11)算出每个效应的平方和：

$$\mathrm{SS}_{\gamma_1} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{D}_1 - \boldsymbol{D}_{12})\boldsymbol{y},$$

$$\mathrm{SS}_{\gamma_2} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{D}_{12} - \boldsymbol{D}_{123})\boldsymbol{y},$$

$$\mathrm{SS}_e = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{123}\boldsymbol{y},$$

其中

$$\boldsymbol{D}_1 = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^-\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}};$$

$$\boldsymbol{D}_{12} = \boldsymbol{D}_1 - \boldsymbol{D}_1\boldsymbol{Z}_1(\boldsymbol{Z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_1\boldsymbol{Z}_1)^-\boldsymbol{Z}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_1;$$

$$\boldsymbol{D}_{123} = \boldsymbol{D}_{12} - \boldsymbol{D}_{12}\boldsymbol{Z}_2(\boldsymbol{Z}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{12}\boldsymbol{Z}_2)^-\boldsymbol{Z}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{12}.$$

第二步　计算 $E(\mathrm{SS}_{\gamma_1}), E(\mathrm{SS}_{\gamma_2})$ 和 $E(\mathrm{SS}_e)$，这时 $\boldsymbol{\gamma}_1$ 和 $\boldsymbol{\gamma}_2$ 不再视为固定效应．

$$E(\mathrm{SS}_{\gamma_1}) = a_1\sigma_1^2 + (a_2 - a_3)\sigma_2^2 + b_2\sigma_0^2,$$

$$E(\mathrm{SS}_{\gamma_2}) = a_2\sigma_2^2 + b_3\sigma_0^2,$$

$$E(\mathrm{SS}_e) = (n - b_1 - b_2 - b_3)\sigma_0^2,$$

其中 $a_i = \mathrm{tr}(\boldsymbol{Z}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_i\boldsymbol{Z}_i), i = 1,2; a_3 = \mathrm{tr}(\boldsymbol{Z}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{12}\boldsymbol{Z}_2); b_1 = \mathrm{rank}(\boldsymbol{X}), b_1 + b_2 = \mathrm{rank}(\boldsymbol{Z}_1 \vdots \boldsymbol{X}); b_1 + b_2 + b_3 = \mathrm{rank}(\boldsymbol{X} \vdots \boldsymbol{Z}_1 \vdots \boldsymbol{Z}_2)$.

第三步　令这些平方和的均值等于对应的平方和，得到关于 σ_0^2, σ_1^2 和 σ_2^2 的线性方程组：

$$a_1\sigma_1^2 + (a_2 - a_3)\sigma_2^2 + b_2\sigma_0^2 = \mathrm{SS}_{\gamma_1},$$

$$a_2\sigma_2^2 + b_3\sigma_0^2 = \mathrm{SS}_{\gamma_2},$$

$$(n - b_1 - b_2 - b_3)\sigma_0^2 = \mathrm{SS}_e.$$

解此方程组得到 $\widehat{\sigma_1}^2, \widehat{\sigma_2}^2$ 和 $\widehat{\sigma_0}^2$，它们就是诸方差分量的方差分析估计．

例 1 简单随机模型 这个模型形式上与单因素方差分析模型一样,即

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + e_{ij} \qquad (i = 1,2,\cdots,a; j = 1,2,\cdots,b),$$

不过现在 α_i 为随机效应. 假定满足 $E(e_i) = 0, \mathrm{var}(\alpha_i) = \sigma_\alpha^2, i = 1,2,\cdots,n$; μ 为非随机参数; e_{ij} 为随机误差, $E(e_{ij}) = 0, \mathrm{var}(e_i) = \sigma_e^2$; e_{ij} 和 α_i 互不相关.

记 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} = (y_{11}, y_{12}, \cdots, y_{ab})$, 视 α_i 为因素 A 的第 i 个水平的固定效应, 则对应的平方和为

$$\mathrm{SS}_A = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2,$$

而对应于误差 e 的平方和为残差平方和, 即

$$\mathrm{SS}_e = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2.$$

求这两个平方和的均值, 得

$$E(\mathrm{SS}_A) = (a-1)b\sigma_\alpha^2 + (a-1)\sigma_0^2,$$

$$E(\mathrm{SS}_e) = a(b-1)\sigma_0^2.$$

命这些均值与对应的平方和相等, 得到方程组:

$$\begin{cases} (a-1)b\sigma_\alpha^2 + (a-1)\sigma_0^2 = \mathrm{SS}_A, \\ a(b-1)\sigma_0^2 = \mathrm{SS}_e. \end{cases}$$

解此方程组, 得方差分量 σ_α^2 和 σ_0^2 的估计:

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_0^2 = \dfrac{\mathrm{SS}_e}{a(b-1)}, \\ \hat{\sigma}_\alpha^2 = \dfrac{\mathrm{SS}_a}{(a-1)b} - \dfrac{\mathrm{SS}_e}{ab(b-1)}. \end{cases}$$

易见 $\hat{\sigma}_0^2$ 总是正的, 而 $\hat{\sigma}_\alpha^2$ 以一定的概率取负值.

3.5 方差分量的检验

上节介绍了方差分量常用的四种估计, 每一种估计都是一个线性方程组的解, 因此, 每一种方法都不能保证所给出的方差分量的估计取正值. 当某些方差分量的估计取负值时, 人们往往认为这是这些方差分量为零的一种证据, 于是就需要检验相应方差分量是否等于零. 一种常用的检验就是下面的沃尔德(A. Wald) 检验.

考虑混合模型

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{Z}_1\boldsymbol{\gamma}_1 + \boldsymbol{Z}_2\boldsymbol{\gamma}_2 + \boldsymbol{e}, \qquad (3\text{-}12)$$

其中 $\boldsymbol{y}$ 为 $n \times 1$ 向量; $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1$ 和 $\boldsymbol{Z}_2$ 分别为 $n \times p$, $n \times q$ 和 $n \times s$ 阶已知设计矩阵; $\boldsymbol{\beta}$ 为 $p \times 1$ 固定效应; $\boldsymbol{\gamma}_1$ 和 $\boldsymbol{\gamma}_2$ 为随机效应. 假设 $\boldsymbol{\gamma}_1, \boldsymbol{\gamma}_2$ 和 $\boldsymbol{e}$ 相互独立, 且 $\boldsymbol{\gamma}_1 \sim N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{R})$, $\boldsymbol{\gamma}_2 \sim N(\boldsymbol{0}, \sigma_2^2\boldsymbol{I}_s)$, $\boldsymbol{e} \sim N(\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{I}_n)$. 现在要检验

$$H: \sigma_2^2 = 0.$$

因为是检验 $\sigma_2^2 = 0$, 所以对 $\boldsymbol{R}$ 不需作任何假设. 如果 $\boldsymbol{R} = \sigma_1^2\boldsymbol{I}_q$, 则下面的方

法可以用来构造假设 $\sigma_1^2 = 0$ 的检验．

在模型式(3-12)中视 $\boldsymbol{\gamma}_1$ 和 $\boldsymbol{\gamma}_2$ 为固定效应．记 $SS_e(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1, \boldsymbol{Z}_2)$ 为残差平方和，即

$$SS_e(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1, \boldsymbol{Z}_2) = \| \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{Z}_1\widehat{\boldsymbol{\gamma}}_1 - \boldsymbol{Z}_2\widehat{\boldsymbol{\gamma}}_2 \|^2,$$

其中 $\widehat{\beta}$、$\widehat{\gamma}_1$ 和 $\widehat{\gamma}_2$ 分别为从式(3-12)得到的 $\boldsymbol{\beta}$，$\boldsymbol{\gamma}_1$ 和 $\boldsymbol{\gamma}_2$ 的最小二乘估计．记 $d_1 = n - \text{rank}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1, \boldsymbol{Z}_2)$，$SS_e(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1)$ 为从模型

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{Z}_1\boldsymbol{\gamma}_1 + \boldsymbol{e} \tag{3-13}$$

得到的残差平方和，当然这时 $\boldsymbol{\gamma}_1$ 仍视为固定效应，于是

$$SS_e(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1) = \| \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\widetilde{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{Z}_1\widetilde{\boldsymbol{\gamma}}_1 \|^2.$$

这里 $\widetilde{\boldsymbol{\beta}}$ 和 $\widetilde{\boldsymbol{\gamma}}_1$ 为从模型式(3-13)得到的 $\boldsymbol{\beta}$ 和 $\boldsymbol{\gamma}_1$ 的最小二乘估计．记 $d_2 = n - \text{rank}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1)$．当 H 成立时，

$$F = \frac{SS_e(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1) - SS_e(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1, \boldsymbol{Z}_2)}{SS_e(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}_1, \boldsymbol{Z}_2)} \sim F_{d_2 - d_1, d_1},$$

于是，对于给定的水平 α，当 $F > F_{d_2 - d_1, d_1}(\alpha)$ 时，拒绝原假设 $H: \sigma_2^2 = 0$；否则接受原假设．

关于混合模型的详细讨论，读者可参阅文献[5]．

4 广义线性模型

4.1 模型概论

4.1.1 广义线性模型的定义

假设 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 为因变量的 n 个独立观测，y_i 服从指数型分布，即它的密度函数具有如下形式：

$$f(y_i | \theta_i, \phi) = \exp\left(\frac{y_i\theta_i - b(\theta_i)}{\phi} + c(y_i, \phi) \right), \tag{4-1}$$

其中 θ_i 和 ϕ 为参数，b 和 c 为两个函数．假设 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n$ 为对应于 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 的 p 维自变量值．记

$$\eta_i = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta},$$

其中 $\boldsymbol{\beta}$ 为 $p \times 1$ 未知参数向量．假设 $E(y_i) = \mu_i$，并且 μ_i 与 η_i 具有关系

$$\eta_i = g(\mu_i) \qquad (i = 1, 2, \cdots, n), \tag{4-2}$$

它等价于

$$\mu_i = h(\eta_i) \qquad (i = 1, 2, \cdots, n), \tag{4-2'}$$

则称式(4-1)和式(4-2)或式(4-1)和式(4-2')定义的模型为**广义线性模型**．关于

这个模型研究的重要著作是文献[6].

在这个模型中,θ_i 称为自然参数,ϕ 称为散离参数,式(4-2) 称为模型的均值结构,g 称为**联系函数**.如果联系函数 $g(\mu_i)=\mu_i$,且 y_i 的分布属于一个分布族,它使得 y_i 彼此不相关,且有等方差,则广义线性模型就变为线性回归模型式(1-7).

广义线性模型是处理各类离散型观测数据的一个十分有效的工具,在生物医学实验、社会调查以及工业产品质量评估等方面都有广泛的应用.

对于分布式(4-1),有

$$E(y_i)=\mu_i=b'(\theta_i), \tag{4-3}$$

$$\operatorname{var}(y_i)=\phi b''(\theta_i), \tag{4-4}$$

其中 $b'(\theta)$ 和 $b''(\theta)$ 分别表示一阶和二阶导数.记

$$v(\mu_i)=b''(\theta), \tag{4-5}$$

称其为方差函数.

4.1.2 指数型分布的若干重要例子

正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$,伯努利(J.Bernoulli) 分布 $B(1,p)$(即试验次数为 1 的二项分布),泊松(Poisson) 分布 $P(\lambda)$,伽玛分布 $\Gamma(\mu,\gamma)$ 和逆高斯分布 $IG(\mu,\sigma^2)$ 都是指数型分布的重要例子.这些分布如表 4-1 所示,其中 $\theta(\mu)$ 是把参数 θ 表示为均值 μ 的函数,它可由式(4-3) 求出.

表 4-1

分布名称	$\theta(\mu)$	$b(\theta)$	ϕ	$E(y)=b'(\theta)$	$\operatorname{var}(y)=b''(\theta)\phi$
正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$	μ	$\theta^2/2$	σ^2	$\mu=\theta$	σ^2
伯努利分布 $B(1,p)$	$\ln\frac{p}{1-p}$	$\ln(1+e^\theta)$	1	$p=\frac{e^\theta}{1+e^\theta}$	$p(1-p)$
泊松分布 $P(\lambda)$	$\ln\lambda$	e^θ	1	$\lambda=e^\theta$	λ
伽玛分布 $\Gamma(\mu,\gamma)$	$-\frac{1}{\mu}$	$-\ln(-\theta)$	$\frac{1}{\gamma}$	$\mu=-\frac{1}{\theta}$	$\frac{\mu^2}{\gamma}$
逆高斯分布 $IG(\mu,\sigma^2)$	$\frac{1}{\mu^2}$	$-(-2\theta)^{1/2}$	σ^2	$\mu=(-2\theta)^{-1/2}$	$\mu^3\sigma^2$

4.1.3 联系函数

从定义式(4-2) 知,联系函数 g 就是自变量的线性组合 $\eta_i=\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}$ 与 y_i 的均值 μ_i 之间的函数关系,它确定了广义线性模型的均值结构.$\mu=b'(\theta)$ 的反函数 $\theta=g(\mu)$ 称为**典则联系函数**.典则联系函数建立了自然参数 θ 与自变量线性组合 $\eta=$

$x^T\beta$之间的直接关系：$\theta = \theta(\mu) = \eta = x^T\beta$，即 $g(\mu) = \theta(\mu)$.

从表4-1容易看出，各种分布的典则联系函数分别有如下形式：

(1) 正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$ $\quad g(\mu) = \mu$.

(2) 伯努利分布 $B(1,\mu)$ $\quad g(\mu) = \ln\frac{\mu}{1-\mu}$.

(3) 泊松分布 $P(\mu)$ $\quad g(\mu) = \ln\mu$.

(4) 伽玛分布 $\Gamma(\mu,\gamma)$ $\quad g(\mu) = -\frac{1}{\mu}$.

(5) 逆高斯分布 $IG(\mu,\sigma^2)$ $\quad g(\mu) = \frac{1}{\mu^2}$.

4.1.4 适用于0-1变量的模型

在一项试验中，如果试验的结果只有两种，这时与这两种结果相对应，可以把因变量 Y 的值分别取为"0"和"1". 将全部试验单元分成 n 个组，设第 i 个组有 n_i 个单元，它们对应的自变量都为 x_i. 在这 n_i 个单元中，设对应的因变量取值为1的单元个数为 y_i，以 p_i 记因变量取1的概率. 这时 y_i 服从二项分布 $B(n_i,p_i)$，且假设 $y_1, y_2,\cdots,y_n$ 相互独立.

对这类数据，对应于联系函数的不同选取，就产生了不同的模型. 下面是几种常用模型.

1. 概率单位模型

设 Φ 为标准正态分布函数，概率单位模型(probit model)是假设 p_i 与 $\eta_i = x_i^T\beta$ 具有如下关系：

$$p_i = \Phi(x_i^T\beta) \qquad (i = 1,2,\cdots,n).$$

2. 对数单位模型

对数单位模型(logit model)是这样的模型，它的典则联系函数为 $g(p) = \ln(p/(1-p))$，于是

$$g(p_i) = \ln\frac{p_i}{1-p_i} = x_i^T\beta \qquad (i = 1,2,\cdots,n).$$

3. ln-ln 模型

这种模型的典则联系函数为 $g(p) = \ln(-\ln(1-p)) = \eta$，于是

$$g(p_i) = \ln(-\ln(1-p_i)) = x_i^T\beta \qquad (i = 1,2,\cdots,n).$$

4.1.5 适用于计数数据的模型

计数数据出现在许多实际应用问题中，例如在一定时间期限内某事件(如交通事故、死亡、投诉等)发生的次数. 一般对于这类数据，泊松分布 $P(\lambda)$ 是首选分布，即观测数据

$$y_i \sim P(\mu_i) \qquad (i = 1,2,\cdots,n).$$

(1) 对数线性模型　这种模型对应于泊松分布的典则联系函数 $\ln(\mu) = \eta$，于是

$$\ln(\mu_i) = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta} \qquad (i = 1,2,\cdots,n).$$

(2) 线性泊松模型 这种模型对应于典则联系函数 $g(\mu) = \mu$，于是

$$\mu_i = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta} \qquad (i = 1,2,\cdots,n).$$

4.2 极大似然估计

在广义线性模型中，因为观测值的分布形式是给定的，所以对这种模型的统计推断大多是基于似然函数．估计的主要兴趣是参数向量 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计．在下面的讨论中，先假定 ϕ 是已知的．在本节末尾给出 ϕ 的一种估计．

4.2.1 似然方程

记

$$l_i(\theta_i) = \ln f(y_i \mid \theta_i, \phi) = \frac{y_i\theta_i - b(\theta_i)}{\phi} \qquad (i = 1,2,\cdots,n).$$

利用 $\theta_i = \theta(\mu_i)$ 可将上式改写为

$$l_i(\mu_i) = \frac{y_i\theta(\mu_i) - b(\theta(\mu_i))}{\phi},$$

将模型均值结构 $\mu_i = h(\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})$ 代入上式，得到

$$l_i(\boldsymbol{\beta}) = l_i(h(\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})).$$

因为 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 是相互独立的，所以对数似然函数为

$$l(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} l_i(\boldsymbol{\beta}). \tag{4-6}$$

似然方程为

$$\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\beta}) = \frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{s}_i(\boldsymbol{\beta}) = 0. \tag{4-7}$$

这里

$$\boldsymbol{s}_i(\boldsymbol{\beta}) = \frac{\boldsymbol{x}_i D_i(\boldsymbol{\beta})}{\sigma_i^2(\boldsymbol{\beta})}(y_i - \mu_i(\boldsymbol{\beta}))$$

称为得分(score)函数．

$$\frac{\partial l}{\partial \boldsymbol{\beta}} = (\frac{\partial l}{\partial \beta_1}, \frac{\partial l}{\partial \beta_2}, \cdots, \frac{\partial l}{\partial \beta_p})^{\mathrm{T}},$$

$$\sigma_i^2(\boldsymbol{\beta}) = v(h(\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}))\phi,$$

$$D_i(\boldsymbol{\beta}) = \left.\frac{\partial h(\eta)}{\partial \eta}\right|_{\eta = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}},$$

其中 $v(\cdot)$ 是由式(4-5)定义的方差函数．

引进矩阵记号

$$\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}},$$

$$\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\beta}) = (\mu_1(\boldsymbol{\beta}), \mu_2(\boldsymbol{\beta}), \cdots, \mu_n(\boldsymbol{\beta}))^{\mathrm{T}},$$
$$\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname{diag}(\sigma_1^2(\boldsymbol{\beta}), \sigma_2^2(\boldsymbol{\beta}), \cdots, \sigma_n^2(\boldsymbol{\beta})),$$
$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname{diag}(D_1(\boldsymbol{\beta}), D_2(\boldsymbol{\beta}), \cdots, D_n(\boldsymbol{\beta})),$$
$$\boldsymbol{X} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}},$$

则似然方程式(4-7)可用下面简洁的形式表示：

$$s(\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\beta})[\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\beta})] = \boldsymbol{0}. \tag{4-8}$$

对于典则联系函数，上述方程变为

$$s(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{\phi}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\beta})] = \boldsymbol{0}.$$

4.2.2　极大似然估计的数值解法

一般说来，似然方程式(4-7)或式(4-8)关于$\boldsymbol{\beta}$都是非线性的，于是需要用迭代方法求解．通常采用的方法之一是迭代加权最小二乘法．给定初始值$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)}$，迭代公式为

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(k+1)} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)} + \boldsymbol{F}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)})s(\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)}) \qquad (k = 0,1,2,\cdots), \tag{4-9}$$

其中$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\beta})$是费希尔信息矩阵，定义为

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{X}, \tag{4-10}$$

其中

$$\boldsymbol{W}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname{diag}(w_1(\boldsymbol{\beta}), w_2(\boldsymbol{\beta}), \cdots, w_n(\boldsymbol{\beta})),$$
$$w_i(\boldsymbol{\beta}) = \frac{D_i^2(\boldsymbol{\beta})}{\sigma_i^2(\boldsymbol{\beta})} \qquad (i = 1,2,\cdots,n).$$

在式(4-9)中，由于$\boldsymbol{F}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)})$和$s(\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)})$中的$\phi$相互抵消，故未知的$\phi$并不出现．

若记

$$\tilde{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{\beta}) = (\tilde{y}_1(\boldsymbol{\beta}), \tilde{y}_2(\boldsymbol{\beta}), \cdots, \tilde{y}_n(\boldsymbol{\beta}))^{\mathrm{T}},$$
$$\tilde{y}_i(\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta} + D_i^{-1}(\boldsymbol{\beta})[y_i - \mu_i(\boldsymbol{\beta})],$$

则迭代公式(4-9)具有如下形式：

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(k+1)} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{(k)}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{(k)}\tilde{\boldsymbol{y}}^{(k)}, \tag{4-11}$$

其中

$$\boldsymbol{W}^{(k)} = \boldsymbol{W}(\boldsymbol{\beta})\big|_{\boldsymbol{\beta}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)}}, \quad \tilde{\boldsymbol{y}}^{(k)} = \tilde{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{\beta})\big|_{\boldsymbol{\beta}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)}}.$$

式(4-11)具有典型的加权最小二乘估计的形式．

4.2.3　参数ϕ的估计

当有了参数$\boldsymbol{\beta}$的估计$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$之后，$\phi$可用下式来估计：

$$\widehat{\phi} = \frac{1}{n-p}\sum_{i=1}^{n}\frac{(y_i - \widehat{\mu}_i)^2}{v(\widehat{\mu}_i)}, \tag{4-12}$$

其中$\widehat{\mu_i}=h(\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}})$和$v(\widehat{\mu_i})$分别是$y_i$的均值和方差函数的估计.

4.2.4 极大似然估计的渐近性质

设当$n\to\infty$时,$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\beta})/n$收敛到一个正定矩阵,则在一般正则条件下,极大似然估计$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$具有下列性质:

1° 当$n\to\infty$时,$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$存在且唯一的概率趋于1.

2° 设$\boldsymbol{\beta}$为参数真值,则当$n\to\infty$时,$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$几乎处处收敛于$\boldsymbol{\beta}$.

3° 当$n\to\infty$时,$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$具有渐近正态性,确切地说,$\widehat{\boldsymbol{\beta}}\sim N(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{F}^{-1}(\boldsymbol{\beta}))$.

4.3 线性假设检验

考虑线性假设

$$H_0:\boldsymbol{A\beta}=\boldsymbol{d},$$

其中$\boldsymbol{A}$为$m\times p$矩阵,$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=m$.在下面的讨论中,将用$\phi$的估计$\widehat{\phi}$代替$\phi$.

4.3.1 似然比统计量

似然比统计量λ定义为

$$\lambda=-2(l(\widetilde{\boldsymbol{\beta}})-l(\widehat{\boldsymbol{\beta}})),$$

其中l为对数似然函数,它由(4-6)式所定义,$\widetilde{\boldsymbol{\beta}}$为在约束$\boldsymbol{A\beta}=\boldsymbol{d}$下的约束极大似然估计,$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$为无约束的极大似然估计.若原假设$H_0$成立,则在与极大似然估计渐近性质要求相同的正则条件下,λ的极限分布为χ_m^2.于是,对于给定水平α,当$\lambda>\chi_m^2(\alpha)$时,拒绝H_0。

4.3.2 沃尔德统计量

沃尔德统计量W定义为

$$W=(\boldsymbol{A}\widehat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{d})^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{A}\boldsymbol{F}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{\beta}})\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}]^{-1}(\boldsymbol{A}\widehat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{d}),$$

其中$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$为$\boldsymbol{\beta}$的无约束极大似然估计,$\boldsymbol{F}^{-1}(\boldsymbol{\beta})$为费希尔信息矩阵,由(4-10)式所定义.沃尔德统计量是$\boldsymbol{A\beta}$的无约束极大似然估计$\boldsymbol{A}\widehat{\boldsymbol{\beta}}$与其假设值$\boldsymbol{d}$之间的一种加权距离,其权矩阵为$\boldsymbol{A}\widehat{\boldsymbol{\beta}}$的渐近协方差阵的估计量的逆.若原假设成立,则在与极大似然估计渐近性质要求相同的正则条件下,W的极限分布为χ_m^2.因此,对于给定水平α,当$W>\chi_m^2(\alpha)$时,拒绝H_0.

似然比统计量需要计算约束和无约束极大似然估计$\widetilde{\boldsymbol{\beta}}$和$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$,而沃尔德统计量只需要计算无约束的极大似然估计$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$,这是沃尔德统计量的一个优点.

4.3.3 得分统计量

得分统计量 u 定义为

$$u = s(\tilde{\boldsymbol{\beta}})^{\mathrm{T}} F^{-1}(\tilde{\boldsymbol{\beta}}) s(\tilde{\boldsymbol{\beta}}),$$

其中 $s(\boldsymbol{\beta})$ 为由式(4-7)定义的得分函数．这个统计量的直观想法是，得分函数 $s(\boldsymbol{\beta})$ 在 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 处的值应为零，即 $s(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = 0$. 如果 H_0 不成立，则约束极大似然估计 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 应该有一定差异，因而 $s(\tilde{\boldsymbol{\beta}})$ 跟零也应该有一定差异．得分统计量 u 正是 $s(\tilde{\boldsymbol{\beta}})$ 与零的加权距离，其权为 $F^{-1}(\tilde{\boldsymbol{\beta}})$. 若原假设 H_0 成立，则与前两种统计量一样，得分统计量的极限分布为 χ_m^2. 因此，对于给定的水平 α，当 $u > \chi_m^2(\alpha)$ 时，拒绝原假设．

4.4 模型拟合优度检验

对于广义线性模型，通常用下面两种统计量来度量模型拟合的程度．

1．广义皮尔逊统计量

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(y_i - \hat{\mu}_i)^2}{v(\hat{\mu}_i)},$$

称为广义皮尔逊(E.S.Pearson)统计量，其中 $\hat{\mu}_i = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{\beta}}$；$v(\cdot)$ 为方差函数．

2．散离(Deviance)统计量

$$D = 2\phi \sum_i \{ l_i(y_i) - l_i(\hat{\mu}_i) \},$$

其中 $l_i(\mu_i)$ 为第 i 个观测值的对数似然函数，$l_i(y_i)$ 是在 $l_i(\mu_i)$ 中用 y_i 代替 μ_i 所得到的值．

对于充分大的 n，以上两个统计量的近似分布皆为 $\phi\chi_{n-p}^2$，这里 p 为向量 $\boldsymbol{\beta}$ 的维数．于是对于给定的水平 α. 当 $\chi^2/\phi > \chi_{n-p}^2(\alpha)$，或 $D/\phi > \chi_{n-p}^2(\alpha)$ 时认为模型拟合得不够好，其中 ϕ 用估计 $\hat{\phi}$ 代替(见式(4-12))．

4.5 统计诊断

和线性回归模型完全类似，在广义线性模型的统计诊断中，基本统计量是残差和库克统计量．诊断方法与线性回归模型基本相同．

4.5.1 残差

1．皮尔逊残差

皮尔逊残差

$$r_i^{\mathrm{P}} = \frac{(y_i - \hat{\mu}_i)}{[\mathrm{var}(y_i)]^{1/2}},$$

这种残差分布跟正态分布有一定差距,主要是关于原点不对称.

2. 安思柯贝残差

安思柯贝(Anscombe)残差是对皮尔逊残差做一定变换而来的.其目的是消除皮尔逊残差分布关于原点的不对称性.

对于几种重要分布,安思柯贝残差具有如下公式.

(1) 对于泊松分布,$y_i \sim P(\lambda_i)$,有

$$r_i^{\mathrm{A}} = \frac{3}{2}\frac{y_i^{2/3} - (\hat{\mu}_i^{2/3} - \hat{\mu}_i^{-1/3}/9)}{\hat{\mu}_i^{1/6}}.$$

(2) 对于二项分布,$y_i \sim B(n_i, p_i)$,有

$$r_i^{\mathrm{A}} = \sqrt{n_i}\,\frac{t(y_i) - \left(t(\hat{p}_i) + \frac{1}{6n_i}(\hat{p}_i(1-\hat{p}_i))^{-1/3}(2\hat{p}_i - 1)\right)}{\hat{p}_i(1-\hat{p}_i)^{1/6}},$$

其中

$$t(u) = \int_0^u x^{-1/3}(1-x)^{-1/3}\mathrm{d}x.$$

3. 散离残差

散离残差 $$r_i^{\mathrm{D}} = \mathrm{sgn}(y_i - \hat{\mu}_i)\sqrt{\chi_{\mathrm{D}}^2(y_i, \hat{\mu}_i)},$$

其中

$$\chi_{\mathrm{D}}^2(y_i, \hat{\mu}_i) = 2(l_i(y_i) - l_i(\hat{\mu}_i)),$$

$$l_i(\mu_i) = \frac{y\theta_i - b(\theta)}{\phi}.$$

特别对于泊松分布,散离残差为

$$r_i^{D} = \mathrm{sgn}(y_i - \hat{\mu}_i)\{2(y_i\ln(y_i/\hat{\mu}_i) - (y_i - \hat{\mu}_i))\}^{1/2}.$$

4.5.2 库克型统计量

记$\hat{\boldsymbol{\beta}}$和$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$分别为完全数据和剔除第$i$组数据$(y_i, \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}})$后$\boldsymbol{\beta}$的极大似然估计.于是$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} - \hat{\boldsymbol{\beta}}$度量了第$i$组数据的影响大小.如果用$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)1}$表示$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$的一步迭代值,则$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)1}$与$\hat{\boldsymbol{\beta}}$有如下关系:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)1} = \hat{\boldsymbol{\beta}} - \frac{\boldsymbol{F}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\beta}})\boldsymbol{x}_i D_i(\hat{\boldsymbol{\beta}})}{\sigma_i(\hat{\boldsymbol{\beta}})(1-h_{ii})}(y_i - \mu_i(\hat{\boldsymbol{\beta}})),$$

其中$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\beta})$,$D_i(\boldsymbol{\beta})$和$\sigma_i^2(\boldsymbol{\beta})$的定义见4.2.1节;$h_{ii}$为广义帽子矩阵$\boldsymbol{H} = [h_{ij}] = \boldsymbol{X}_0(\boldsymbol{X}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_0)^{-1}\boldsymbol{X}_0^{\mathrm{T}}$的第$i$个对角元,

$$\boldsymbol{X}_0 = \boldsymbol{A}^{1/2}(\hat{\boldsymbol{\beta}})\boldsymbol{X},$$

其中 $A^{1/2}$ 表示方阵 A 的平方根阵．

库克统计量定义为：

$$c_i = (\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)1} - \hat{\boldsymbol{\beta}})^{\mathrm{T}} \mathrm{cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}})^{-1} (\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)1} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) = \frac{h_{ii}}{1 - h_{ii}} (r_i^{\mathrm{P}})^2.$$

它刻画了第 i 组数据$(y_i, \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}})$对极大似然估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$的影响大小．

参 考 文 献

1　王松桂．线性模型的理论及其应用．合肥：安徽教育出版社，1987.

2　Wang Songgui, Chow Sheinchung. Advanced linear models. New York: Marcel Dekker Inc., 1994.

3　陈希孺，王松桂．近代回归分析．合肥：安徽教育出版社，1987.

4　韦博成，鲁国斌，史建清．统计诊断引论．南京：东南大学出版社．

5　Searle S R, Casella G, MuCullo C. Variance components. New York: John Wiley, 1992.

6　Mucullagh P, Nelder J A. Generalized linear models. 2nd ed. New York: Cha man and Hall, 1989.

·随机数学卷·

第 7 篇

多元统计分析

编　者　吴启光　耿　直
审校者　郑忠国

目　录

引　言

多元统计分析是统计学的一个重要分支.它探讨高维数据的内在规律,例如研究多元变量间的相互关系、数据结构和数据简化等.

在19世纪,拉普拉斯(P.S.Laplace)、高斯(G.F.Gauss)和高尔顿(F.Galton)等就已经研究了多元正态分布理论.1889年,高尔顿提出了两个变量间相关和回归的概念.1896年,皮尔逊(K.Pearson)提出了偏相关和复相关理论.1904年,斯皮尔曼(C.Spearman)在研究智力测验问题中提出了因子分析模型.1928年,威沙特(J.Wishart)导出了多元正态样本协方差阵的精确分布——威沙特分布.霍特林(H.Hotelling)在1931年导出了T^2统计量,在1933年相当详细地论述了主成分分析方法,在1935年提出了典型相关理论.费希尔(R.A.Fisher)于1936年提出了费希尔判别准则和方法.我国著名统计学家许宝騄教授在多元统计分析理论研究中也作出了杰出的贡献.

随着生产力的提高、科学研究的深入、计算机的出现和发展,多元统计分析的理论和方法也不断发展、完善,并已被应用到科学研究的大多数领域以及商业和管理学的许多领域.

根据数据度量尺度的不同,多元统计分析可分为连续型多元统计分析和离散型多元统计分析两大类.本篇前五章介绍连续型多元统计分析的基本内容,后六章介绍离散型多元统计分析的基本内容.

1　多元正态分布和有关分布

1.1　多元正态分布

多元正态分布在多元统计分析中充当着重要的角色.其原因在于在相当多的实际问题中,高维数据遵从正态分布或近似的正态分布,而多维正态分布和由它产生的抽样分布比较容易处理.

设 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_p)^{\mathrm{T}}$ 是 p 维随机向量.若对于任意的 p 维常数向量 $\boldsymbol{c}$,都有 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 遵从一维正态分布,则称 $\boldsymbol{y}$ 为 p 维正态随机变量,称 $\boldsymbol{y}$ 的分布为 p 维正态分布.这个分布完全由其均值向量 $\boldsymbol{\mu}=E\boldsymbol{y}$ 和协方差阵 $\boldsymbol{V}=\mathrm{cov}(\boldsymbol{y})$ 确定,记之为 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{V})$.称 $N_p(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_p)$ 为 p 维标准正态分布,此处 $\boldsymbol{I}_p$ 是 p 阶单位矩阵.

当 $\boldsymbol{V}>\boldsymbol{0}$(即 $\boldsymbol{V}$ 为正定矩阵)时,$N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{V})$ 有分布密度函数

$$f = (2\pi)^{-\frac{p}{2}} \mid V \mid^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y-\mu)^{\mathrm{T}} V^{-1}(y-\mu)\right). \tag{1-1}$$

当 V 不是正定矩阵时，$N_p(\mu, V)$ 没有分布密度函数，此时称 $N_p(\mu, V)$ 为退化 p 维正态分布.

1.1.1　多元正态分布的性质

设 $y \sim N_p(\mu, V)$，即 y 遵从分布 $N_p(\mu, V)$.

1° 对于 $m \times p$ 常数矩阵 B 和 m 维常数向量 c，有

$$By + c \sim N_m(B\mu + c, BVB^{\mathrm{T}}).$$

由此可知，y 的部分元素构成的向量仍然遵从正态分布.

2° 若 $y = (y_1^{\mathrm{T}} y_2^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$，即将 y 分成 y_1, y_2 两块，对 μ 和 V 也作相应的分块，即

$$\mu = (\mu_1^{\mathrm{T}}, \mu_2^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}, \quad V = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{bmatrix}.$$

其中 y_1 和 μ_1 都是 q 维向量，V_{11} 是 $q \times q$ 矩阵，则有

(i) 在给定 y_2 下，y_1 的条件分布为

$$N_q(\mu_1 + V_{12}V_{22}^{+}(y_2 - \mu_2), V_{11} - V_{12}V_{22}^{+}V_{21}),$$

其中 V_{22}^{+} 是 V_{22} 的加号广义逆，即穆尔 - 彭罗斯(Moore-Penrose)逆.

(ii) $y_1 - V_{12}V_{22}^{+}y_2$ 与 y_2 独立；y_1 与 $y_2 - V_{21}V_{11}^{+}y_1$ 独立.

3° 若 $y = (y_1^{\mathrm{T}}, y_2^{\mathrm{T}}, \cdots, y_k^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$，即 y 分成 $y_1, y_2, \cdots, y_k$，共 k 个子向量，对 V 也作相应的分块，即

$$V = \begin{bmatrix} V_{11} & \cdots & V_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ V_{k1} & \cdots & V_{kk} \end{bmatrix},$$

y_i 的维数等于方阵 V_{ii} 的阶数，$i = 1, 2, \cdots, k$，则 $y_1, y_2, \cdots, y_k$ 相互独立的充分必要条件是

$$V_{ij} = 0 \qquad (1 \leqslant i < j \leqslant k).$$

1.1.2　多元正态分布参数的估计

设 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 是来自 $N_p(\mu, V)$ 的独立同分布样本，$n \geqslant 2$，$\mu \in \mathbf{R}^p$（p 维欧氏空间）和 $V > 0$ 都是参数．记

$$\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i, \quad S = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})(y_i - \bar{y})^{\mathrm{T}},$$

则有

1° $(\bar{y}, S)$ 是完全充分统计量，且 $\bar{y}$ 与 S 独立．

2° 当 $n > p$ 时，$(\bar{y}, \frac{1}{n}S)$ 是 (μ, V) 的**极大似然估计**．

3° $(\bar{y}, (n-1)^{-1}S)$ 是 (μ, V) 在下述意义下的**最优无偏估计**：对于 (μ, V) 的任意无偏估计 $(\hat{\mu}, \hat{V})$，一切 $\mu \in \mathbf{R}^p$ 和 $V > 0$，都有

$$E((\hat{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}(\hat{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu})+\operatorname{tr}(\hat{\boldsymbol{V}}-\boldsymbol{V})^2)$$
$$\geqslant E((\bar{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}(\bar{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{\mu})+\operatorname{tr}((n-1)^{-1}\boldsymbol{S}-\boldsymbol{V})^2),$$

其中 $\operatorname{tr}\boldsymbol{B}$ 表示方阵 $\boldsymbol{B}$ 的迹，即 $\boldsymbol{B}$ 的对角线元素之和．上式表明，$(\bar{\boldsymbol{y}},(n-1)^{-1}\boldsymbol{S})$ 的元素是 $(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{V})$ 相应元素的一致最小方差无偏估计．

1.2 威沙特分布

假定 $\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_n$ 相互独立，$\boldsymbol{y}_i\sim N_p(\boldsymbol{\mu}_i,\boldsymbol{V})$，$\boldsymbol{\mu}_i\in\mathbf{R}^p$，$i=1,2,\cdots,n$，$\boldsymbol{V}\geqslant\mathbf{0}$．此处 $\boldsymbol{B}\geqslant\boldsymbol{C}$ 意为 $\boldsymbol{B}-\boldsymbol{C}$ 是对称非负定矩阵．记

$$\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}=[\boldsymbol{y}_1\ \boldsymbol{y}_2\ \cdots\ \boldsymbol{y}_n],\quad \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}=[\boldsymbol{\mu}_1\ \boldsymbol{\mu}_2\ \cdots\ \boldsymbol{\mu}_n],$$

则称
$$\boldsymbol{A}\cong\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Y}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{y}_i\boldsymbol{y}_i^{\mathrm{T}}$$

的分布为 p 维威沙特分布，记之为 $W_p(n,\boldsymbol{V},\boldsymbol{M})$，其中 n 称为自由度，$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{\mu}_i\boldsymbol{\mu}_i^{\mathrm{T}}$ 称为非中心参数．当 $\boldsymbol{M}=0$ 时，威沙特分布称为中心威沙特分布，并记为 $W_p(n,\boldsymbol{V})$．威沙特分布在多元分析中是非常重要的分布．

当 $p=1$ 且 $\sigma^2\overset{\text{def}}{=\!=}V>0$ 时，$\sigma^{-2}A$ 遵从自由度为 n 非中心参数为 M/σ^2 的 χ^2 分布，记之为 $\chi^2(n,M/\sigma^2)$，因此，威沙特分布是 χ^2 分布的推广．

若 $\boldsymbol{A}\sim W_p(n,\boldsymbol{V},\boldsymbol{M})$，$\boldsymbol{V}>\mathbf{0}$，且 $n\geqslant p$，则

$$\boldsymbol{A}>\mathbf{0}\qquad\text{(a.s.)},$$

即 $\boldsymbol{A}$ 几乎处处是正定的．

当 $\boldsymbol{A}\sim W_p(n,\boldsymbol{V})$，$\boldsymbol{V}>0$，且 $n\geqslant p$ 时，$\boldsymbol{A}$ 有分布密度函数

$$f(\boldsymbol{A};n,p,\boldsymbol{V})=\begin{cases}\dfrac{|\boldsymbol{A}|^{\frac{1}{2}(n-p-1)}\exp\left(-\dfrac{1}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\right)}{2^{\frac{np}{2}}\pi^{\frac{1}{4}p(p-1)}|\boldsymbol{V}|^{\frac{n}{2}}\prod\limits_{i=1}^{p}\Gamma\left(\dfrac{n-i+1}{2}\right)} & (\boldsymbol{A}>\mathbf{0}),\\ 0 & (\text{其他}).\end{cases}$$

威沙特分布有下列性质：

1° 若 $\boldsymbol{A}\sim W_p(n,\boldsymbol{V},\boldsymbol{M})$，则对于任意的 $m\times p$ 常数矩阵 $\boldsymbol{B}$，有

$$\boldsymbol{BAB}^{\mathrm{T}}\sim W_m(n,\boldsymbol{BVB}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{BMB}^{\mathrm{T}}).$$

2° 若 $\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\cdots,\boldsymbol{A}_k$ 相互独立，且 $\boldsymbol{A}_i\sim W_p(n_i,\boldsymbol{V})$，$i=1,2,\cdots,k$，则

$$\sum_{i=1}^{k}\boldsymbol{A}_i\sim W_p(n,\boldsymbol{V}),$$

其中
$$n=\sum_{i=1}^{k}n_i.$$

3° 设 $\boldsymbol{A}\sim W_p(n,\boldsymbol{V},\boldsymbol{M})$，把 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{V},\boldsymbol{M}$ 作相同的分块，

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{k1} & \cdots & A_{kk} \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} V_{11} & \cdots & V_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ V_{k1} & \cdots & V_{kk} \end{bmatrix}, \quad M = \begin{bmatrix} M_{11} & \cdots & M_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ M_{k1} & \cdots & M_{kk} \end{bmatrix},$$

其中 A_{ii}, V_{ii}, M_{ii} 都是 r_i 阶方阵，$i = 1, \cdots, k$，则

$$A_{ii} \sim W_{r_i}(n, V_{ii}, M_{ii}) \qquad (i = 1, 2, \cdots, k).$$

若 $V_{ij} = 0, 1 \leqslant i < j \leqslant k$，则 $A_{11}, A_{22}, \cdots, A_{kk}$ 相互独立．

4° 若 $A \sim W_p(n, V, M)$，且 $V > 0$，则对于任意的 p 维非零常数向量 a，有

$$a^{\mathrm{T}} A a \sim \sigma_a^2 \chi^2(n, \delta),$$

其中
$$\sigma_a^2 = a^{\mathrm{T}} V a, \quad \delta = a^{\mathrm{T}} M a / \sigma_a^2.$$

5° 设 C 是 n 阶实对称矩阵，且 $V > 0$，则

$$Y^{\mathrm{T}} C Y \sim W_p(r, V, \Omega),$$

其中 $\Omega = U^{\mathrm{T}} C U \Leftrightarrow C$ 为幂等矩阵，且 rank $C = r$，rank C 表示 C 的秩，Y 的分布及其参数与本节开头所述的相同．

由这条性质可知，1.1.2 小节中的随机矩阵 $S \sim W_p(n-1, V)$.

6° 设 $V > 0, C_1, C_2, \cdots, C_k$ 都是 n 阶实对称矩阵，$C = \sum_{i=1}^{k} C_i$，rank $C_i = r_i$，$i = 1, 2, \cdots, k$，rank $C = m$．考虑以下四个条件：

(i) $C_1, C_2, \cdots, C_k$ 都是幂等矩阵，

(ii) $C_i C_j = 0 \qquad (i \neq j; i, j = 1, 2, \cdots, k)$，

(iii) C 是幂等矩阵，

(iv) $m = \sum_{i=1}^{k} r_i$，

则当(i)，(ii)，(iii) 中有两个成立或(iii) 和(iv) 成立时，都有

(a) $Y^{\mathrm{T}} C_i Y \sim W_p(r_i, V, M_i)$，

其中　$M_i = U^{\mathrm{T}} C_i U \qquad (i = 1, 2, \cdots, k)$.

(b) $Y^{\mathrm{T}} C_1 Y, Y^{\mathrm{T}} C_2 Y, \cdots, Y^{\mathrm{T}} C_k Y$ 相互独立.

(c) $Y^{\mathrm{T}} C Y \sim W_p(m, V, M)$，

其中　$M = U^{\mathrm{T}} C U$.

1.3　T^2 统计量和 Λ 统计量

T^2 统计量和 Λ 统计量在多元统计分析中是经常用到的很重要的统计量．

设 $A \sim W_m(n, V), n \geqslant m, x \sim N_m(\mu, V), V > 0$，且 A 和 x 相互独立，则称

$$T^2(m, n, \mu) \stackrel{\text{def}}{=\!=} n x^{\mathrm{T}} A^{-1} x$$

为非中心**霍特林 T^2 统计量**．当 $\mu = 0$ 时，称之为中心 T^2 统计量，并记为 $T^2(m, n)$．当 $m = 1$ 时，$T^2(m, n, \mu)$ 是一元统计分析中 t 统计量的平方，因此 T^2 统计量是 t 统计量的推广．

用 $F(m,n,\lambda)$ 表示分子自由度为 m、分母自由度为 n、非中心参数为 λ 的 F 分布，$F(m,n)$ 表示中心(即 $\lambda=0$ 时) F 分布，则

$$(mn)^{-1}(n-m+1)T^2(m,n,\boldsymbol{\mu}) \sim F(m,n-m+1,\lambda),$$
$$\lambda = \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{\mu};$$
$$(mn)^{-1}(n-m+1)T^2(m,n) \sim F(m,n-m+1).$$

若 $\boldsymbol{A}_1 \sim W_m(n_1,\boldsymbol{V})$，$n_1 \geqslant m$，$\boldsymbol{A}_2 \sim W_m(n_2,\boldsymbol{V})$，$V>\boldsymbol{0}$，且 $\boldsymbol{A}_1$ 和 $\boldsymbol{A}_2$ 相互独立，则称

$$\Lambda(m,n_1,n_2) \xlongequal{\text{def}} \frac{|\boldsymbol{A}_1|}{|\boldsymbol{A}_1+\boldsymbol{A}_2|}$$

为**威尔克斯**(S.S.Wilks)**统计量**.

当 $m=1$ 时，$\Lambda(1,n_1,n_2)$ 遵从参数为 $(\frac{n_1}{2},\frac{n_2}{2})$ 的 β 分布．一般地，$\Lambda(m,n_1,n_2)$ 是 m 个相互独立的遵从 β 分布的随机变量的乘积，它们的参数分别为 $(\frac{n_1-m+1}{2},\frac{n_2}{2})$，$(\frac{n_1-m+2}{2},\frac{n_2}{2})$，…，$(\frac{n_1}{2},\frac{n_2}{2})$.

T^2 统计量和 Λ 统计量有下述关系：

当 $n \geqslant m$ 时，

$$\Lambda(m,n,1) = \frac{1}{(1+n^{-1}T^2(m,n))},$$
$$T^2(m,n) = \frac{n(1-\Lambda(m,n,1))}{\Lambda(m,n,1)}.$$

文献[1]给出了 Λ 统计量的下侧 0.05 和 0.01 分位数.

2 多因变量线性回归和典型相关

2.1 多因变量线性回归

在许多实际问题中，一组变量 $y_1,y_2,\cdots,y_q$ 与另一组变量 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 的关系密切，但由于存在随机误差和其他一些原因，这两组变量还没有密切到能由其中一组变量的取值唯一地确定另一组变量取值的程度．变量间这种非确定关系称之为相关关系．

回归分析是统计学中应用非常广泛的重要分支．它所研究的问题是，在存在相关关系的两组变量中，寻找因变量 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}=(y_1,y_2,\cdots,y_q)$ 与自变量 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}=(x_1,x_2,\cdots,x_m)$ 相关关系的形式，并据此通过 $\boldsymbol{x}$ 来预报 $\boldsymbol{y}$. 当用

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = (g_1(\boldsymbol{x}),g_2(\boldsymbol{x}),\cdots,g_q(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}$$

来拟合 $\boldsymbol{y}$ 时，有

$$\begin{aligned} & E(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}} \\ &\quad = E(\boldsymbol{y}-E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x}))(\boldsymbol{y}-E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}+ \\ &\qquad E(E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x})-\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))(E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x})-\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}} \\ &\quad \geqslant E(\boldsymbol{y}-E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x}))(\boldsymbol{y}-E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}, \end{aligned}$$

等号成立的充分必要条件是 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})=E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x})$. 因此,用

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=(f_1(\boldsymbol{x}),f_2(\boldsymbol{x}),\cdots,f_q(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}\xlongequal{\text{def}}E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x})$$

来拟合 $\boldsymbol{y}$,其均方差矩阵达到最小(在非负定意义下). 称 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 为 $\boldsymbol{y}$ 对 $\boldsymbol{x}$ 的回归函数,它反映了 $\boldsymbol{y}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 相关关系的主要部分. 这样,可把 $\boldsymbol{y}$ 分解成两部分:

$$\boldsymbol{y}=(f_1(\boldsymbol{x}),f_2(\boldsymbol{x}),\cdots,f_q(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{\varepsilon}. \tag{2-1}$$

根据回归函数的定义,有

$$E\boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{0}. \tag{2-2}$$

式(2-1)和式(2-2)一起构成一个理论上的回归模型.

实际上,要确定 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 并不容易. 在通常情况下,并不知道 $\boldsymbol{y}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 的联合分布,从而无法求 $E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x})$. 即使知道 $\boldsymbol{y}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 的联合分布的类型,$E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x})$ 也含有未知参数,需要用数据去估计它们. 此外,除 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 外,可能还有一些自变量对 $\boldsymbol{y}$ 有大的影响;而 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 中也可能有的变量对 $\boldsymbol{y}$ 的影响小,可以忽略.

当对回归函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 一无所知时,回归模型称为非参数性的;另一种情况是 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 的形式已知,但含有未知参数,其中简单且重要的情形是,$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 为未知参数的线性函数:

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{\beta}_0+g_1(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\beta}_1+g_2(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+g_k(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\beta}_k,$$

其中 $g_1(\boldsymbol{x}),g_2(\boldsymbol{x}),\cdots,g_k(\boldsymbol{x})$ 都是 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_m)^{\mathrm{T}}$ 的已知函数. 例如 $g_1(\boldsymbol{x})=x_1^2,g_2(\boldsymbol{x})=x_2x_3$ 等;$\boldsymbol{\beta}_0,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_k$ 都是 q 维未知参数向量,

$$\boldsymbol{\beta}_i=(\boldsymbol{\beta}_{i1},\boldsymbol{\beta}_{i2},\cdots,\boldsymbol{\beta}_{iq})^{\mathrm{T}}\qquad(i=0,1,2,\cdots,k).$$

把 $g_1(\boldsymbol{x}),g_2(\boldsymbol{x}),\cdots,g_k(\boldsymbol{x})$ 作为新的自变量,可把模型简化为下述形式:

$$E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x})=\boldsymbol{h}(x_1,x_2,\cdots,x_p)=\boldsymbol{\beta}_0+x_1\boldsymbol{\beta}_1+x_2\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+x_p\boldsymbol{\beta}_p. \tag{2-3}$$

当 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的联合分布是正态时,$E(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x})$ 便有式(2-3)的形式. 在实际问题中,人们往往把自变量看成是非随机的. 这在理论上有某些方便,且在一些重要方面不影响问题的实质.

本节考虑自变量非随机的**多因变量线性回归模型**

$$\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_q)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{\beta}_0+x_1\boldsymbol{\beta}_1+x_2\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+x_p\boldsymbol{\beta}_p+\boldsymbol{\varepsilon}, \tag{2-4}$$

其中 $\boldsymbol{\varepsilon}=(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_q)^{\mathrm{T}}$ 是误差向量,$E\boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{0}$. $\boldsymbol{y}$ 的随机性来自 $\boldsymbol{\varepsilon}$. $\boldsymbol{y}$ 的分布除了均值 $\boldsymbol{\beta}_0+x_1\boldsymbol{\beta}_1+\cdots+x_p\boldsymbol{\beta}_p$ 外,完全由 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的分布决定. $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的来源除随机误差外,还可能来自回归函数选择不当(非线性或没有包含其他的重要自变量). 为了对模型式(2-4)作统计推断,需要收集因变量和自变量的数据. 假定对 $(y_1,y_2,\cdots,y_q,x_1,x_2,\cdots,x_p)$ 进行了 n 次观测,得到

$$y_{i1},y_{i2},\cdots,y_{iq},x_{i1},x_{i2},\cdots,x_{ip}\qquad(i=1,2,\cdots,n).$$

由式(2-4),有

$$(y_{i1}, y_{i2}, \cdots, y_{iq}) = \boldsymbol{\beta}_0^{\mathrm{T}} + x_{i1}\boldsymbol{\beta}_1^{\mathrm{T}} + x_{i2}\boldsymbol{\beta}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + x_{ip}\boldsymbol{\beta}_p^{\mathrm{T}} + (\varepsilon_{i1}, \varepsilon_{i2}, \cdots, \varepsilon_{iq}) \quad (i = 1, 2, \cdots, n). \tag{2-5}$$

为了用矩阵形式来描述模型式(2-5),记

$$\boldsymbol{Y} = \begin{bmatrix} y_{11} & \cdots & y_{1q} \\ \vdots & & \vdots \\ y_{n1} & \cdots & y_{nq} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}_{(1)}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{y}_{(n)}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{y}_1\ \boldsymbol{y}_2 \cdots \boldsymbol{y}_q], \tag{2-6}$$

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_{(1)}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_{(n)}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{x}_1\ \boldsymbol{x}_2 \cdots \boldsymbol{x}_p], \tag{2-7}$$

$$\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_0^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{\beta}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\beta}_p^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{b}_1\ \boldsymbol{b}_2 \cdots \boldsymbol{b}_q], \quad \boldsymbol{b}_j = (\beta_{0j}, \beta_{1j}, \cdots, \beta_{pj})^{\mathrm{T}}, \tag{2-8}$$

$$\boldsymbol{E} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \cdots & \varepsilon_{1q} \\ \vdots & & \vdots \\ \varepsilon_{n1} & \cdots & \varepsilon_{nq} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{(1)}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{(n)}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{\varepsilon}_1\ \boldsymbol{\varepsilon}_2 \cdots \boldsymbol{\varepsilon}_q]. \tag{2-9}$$

模型式(2-5)可改写成

$$\boldsymbol{Y} = [\boldsymbol{1}\ \boldsymbol{X}]\boldsymbol{B} + \boldsymbol{E}, \tag{2-10}$$

其中1是元素都为1的 n 维向量,有时记为 $\boldsymbol{1}_n$.

一般假定

$$E\boldsymbol{E} = 0, \tag{2-11}$$

$$\mathrm{cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}, \boldsymbol{\varepsilon}_{(j)}) = \delta_{ij}\boldsymbol{V} \qquad (i, j = 1, 2, \cdots, n), \tag{2-12}$$

其中

$$\boldsymbol{V} > \boldsymbol{0},$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j), \\ 0 & (i \neq j). \end{cases}$$

式(2-12)即是假定 $\boldsymbol{y}_{(1)}, \boldsymbol{y}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{y}_{(n)}$ 两两不相关,有相同的协方差矩阵 $\boldsymbol{V}$. 人们还假定

$$\mathrm{rank}\,[\boldsymbol{1} \quad \boldsymbol{X}] = p + 1. \tag{2-13}$$

2.1.1 参数估计

对于模型式(2-10),首先要考虑的问题是参数矩阵 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 的估计. 常用的估计是最小二乘估计和极大似然估计. 给出了 $\boldsymbol{B}$ 的估计 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 后,便可建立预报方程

$$\hat{\boldsymbol{y}}^{\mathrm{T}} = (1, x_1, x_2, \cdots, x_p)\hat{\boldsymbol{B}}$$

或称经验回归方程,它可预报 $\boldsymbol{y}$ 在 $(x_1, x_2, \cdots, x_p)$ 处的值.

1. 最小二乘估计

在模型式(2-10)下,记 $Z = [1\ X]$,

$$\hat{B} = (Z^{T}Z)^{-1}Z^{T}Y, \tag{2-14}$$

则有

$$(Y - ZB)^{T}(Y - ZB) = (Y - Z\hat{B})^{T}(Y - Z\hat{B}) + (\hat{B} - B)^{T}Z^{T}Z(\hat{B} - B)$$
$$\geqslant (Y - Z\hat{B})^{T}(Y - Z\hat{B}),$$

等号成立的充分必要条件是 $B = \hat{B}$;更有

$$\mathrm{tr}((Y - ZB)^{T}(Y - ZB)) \geqslant \mathrm{tr}((Y - Z\hat{B})^{T}(Y - Z\hat{B})),$$

等号成立的充分必要条件是 $B = \hat{B}$. 后一不等式表明,当且仅当 $B = \hat{B}$时,$(Y - ZB)$的所有元素的平方和达到最小,因此 $\hat{B}$是 B 的最小二乘估计. 易知 $E\hat{B} = B$,即 $\hat{B}$是 B 的无偏估计. 在假定式(2-11)和式(2-12)下,$\hat{B}$还有下述性质:

设 C 是列数为 n 的常数矩阵,则对于 CZB 的任意线性无偏估计 LY,一切 B 和一切 $V > 0$,都有

$$E((LY - CZB)(LY - CZB)^{T}) \geqslant E((CZ\hat{B} - CZB)(CZ\hat{B} - CZB)^{T}), \tag{2-15}$$

更有

$$E\{\mathrm{tr}((LY - CZB)(LY - CZB)^{T})\} \geqslant E\{\mathrm{tr}((CZ\hat{B} - CZB)(CZ\hat{B} - CZB)^{T}.)\}$$

因此 $CZ\hat{B}$是 CZB 在式(2-15)意义下的**最优线性无偏估计**.

称 $\hat{\varepsilon} \overset{\text{def}}{=\!=} Y - Z\hat{B}$为残差矩阵. 记 $P_Z = Z(Z^{T}Z)^{-1}Z^{T}$. 称

$$Q \overset{\text{def}}{=\!=} \hat{\varepsilon}^{T}\hat{\varepsilon} = Y^{T}(I - P_Z)Y \tag{2-16}$$

为残差平方和矩阵. 当 $n > p + 1$ 时,

$$\hat{V} \overset{\text{def}}{=\!=} \frac{Q}{n - p - 1} \tag{2-17}$$

是 V 的无偏估计.

从式(2-14)可看出,$\hat{B}$的第 i 列$\hat{b}_i$ 是在模型"$y_i = Zb_i + \varepsilon_i, E\varepsilon_i = 0, E\varepsilon_i\varepsilon_i^{T} = v_{ii}I_n$"下 b_i 的最小二乘估计,此处 v_{ii} 是 V 的(i,i)元素.

2. 极大似然估计

在模型式(2-10)下,假定 $\varepsilon_{(1)}, \varepsilon_{(2)}, \cdots, \varepsilon_{(n)}$ 独立同分布,

$$\varepsilon_{(1)} \sim N_q(0, V), \tag{2-18}$$

则当 $n \geqslant p + q + 1$ 时,$\hat{B}$(见式 2-14))和 $\hat{V}_{ML} \overset{\text{def}}{=\!=} \frac{1}{n}Q$($Q$ 见式(2-16))分别是 B 和 V 的极大似然估计.

3. 估计的其他性质

在式(2-10)和式(2-18)下,有

1° $$\operatorname{vec}(\widehat{\boldsymbol{B}}) \sim N_{(p+1)q}(\operatorname{vec}(\boldsymbol{B}), \boldsymbol{V} \otimes (\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z})^{-1}),$$

其中 $\operatorname{vec}(\widehat{\boldsymbol{B}})$ 表示由 $\widehat{\boldsymbol{B}}$ 的列拉直所成的 $(p+1)q$ 维向量；记号 $\otimes$ 是克罗内克(Z. Kronecker)乘积．

2° 当 $n > p+1$ 时，

$$\boldsymbol{Q} \sim W_q(n-p-1, \boldsymbol{V}).$$

3° $\widehat{\boldsymbol{B}}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 相互独立．

4° 当 $n > p+1$ 时，$(\widehat{\boldsymbol{B}}, \widehat{\boldsymbol{V}})$ 是 $(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{V})$ 在下述意义下的最优无偏估计：对于 $(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{V})$ 的任意无偏估计 $(\breve{\boldsymbol{B}}, \breve{\boldsymbol{V}})$，一切 $\boldsymbol{B}$ 和一切 $\boldsymbol{V} > 0$，都有

$$\begin{aligned} & E\{\operatorname{tr}((\breve{\boldsymbol{B}} - \boldsymbol{B})^{\mathrm{T}}(\breve{\boldsymbol{B}} - \boldsymbol{B})) + \operatorname{tr}(\breve{\boldsymbol{V}} - \boldsymbol{V})^2\} \\ & \geqslant E\{\operatorname{tr}((\widehat{\boldsymbol{B}} - \boldsymbol{B})^{\mathrm{T}}(\widehat{\boldsymbol{B}} - \boldsymbol{B})) + \operatorname{tr}(\widehat{\boldsymbol{V}} - \boldsymbol{V})^2\}. \end{aligned}$$

这蕴含了 $(\widehat{\boldsymbol{B}}, \widehat{\boldsymbol{V}})$ 的元素是 $(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{V})$ 相应元素的一致最小方差无偏估计．

2.1.2 线性相关显著性检验

对于线性回归模型式(2-10)，在假定式(2-18)和 $n > p+q+1$ 下，考虑假设

$$H: \boldsymbol{\beta}_1 = \boldsymbol{\beta}_2 = \cdots = \boldsymbol{\beta}_p = 0 \tag{2-19}$$

的检验问题．当假设 H 不被否定时，由式(2-10)知，$\sum_{j=1}^{p} x_j \boldsymbol{\beta}_0^{\mathrm{T}}$ 的元素的绝对值小，而 $\boldsymbol{1}\boldsymbol{\beta}_0^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\varepsilon}$ 的元素的绝对值大．这说明 $y_1, y_2, \cdots, y_q$ 对 $x_1, x_2, \cdots, x_p$ 的线性回归没有实际意义．造成这种情况的可能原因是，对 $y_1, y_2, \cdots, y_q$ 影响大的自变量没有包含在 $x_1, x_2, \cdots, x_p$ 中，或者回归函数不是线性的．当假设 H 被否定时，所选自变量的全体对 $y_1, y_2, \cdots, y_q$ 确有影响，因而基于它们的线性回归模型在实际中有一定的意义．由于检验假设 H 是在线性回归模型式(2-10)的前提下进行的，H 是否被否定，可解释为 $y_1, y_2, \cdots, y_q$ 与 $x_1, x_2, \cdots, x_p$ 的线性关系是否显著．

对于检验问题式(2-19)，由极大似然比方法导出了检验统计量

$$\Lambda = \frac{|\boldsymbol{Q}|}{|\boldsymbol{Q}_H|}, \tag{2-20}$$

其中 $\boldsymbol{Q}$ 如式(2-16)所示；

$$\boldsymbol{Q}_H = \boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I} - n^{-1}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{Y} = (\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{1}\overline{\boldsymbol{Y}}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{1}\overline{\boldsymbol{Y}}^{\mathrm{T}}), \tag{2-21}$$

$$\overline{\boldsymbol{Y}} = n^{-1}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{1}.$$

当 Λ 小时，否定 H. 在 H 成立条件下，Λ 是威尔克斯统计量 $\Lambda(q, n-p-1, p)$. 给定显著水平 α，查出 $\Lambda(q, n-p-1, p)$ 的下侧分位数 $\Lambda_\alpha(q, n-p-1, p)$. 当 $\Lambda \leqslant \Lambda_\alpha(q, n-p-1, p)$ 时，否定 H(在显著水平 α 下).

下面从平方和矩阵分解角度来解释这个检验．n 次试验结果 $\boldsymbol{y}_{(1)}, \boldsymbol{y}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{y}_{(n)}$ 是不全相同的，它们的差异程度可用矩阵 $\boldsymbol{Q}_H$ 的行列式 $|\boldsymbol{Q}_H|$ 来刻画．$\boldsymbol{y}_{(1)}, \boldsymbol{y}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{y}_{(n)}$ 的变化大，$|\boldsymbol{Q}_H|$ 就大．造成 $\boldsymbol{y}_{(1)}, \boldsymbol{y}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{y}_{(n)}$ 参差不齐的原因有 $x_1, x_2,$

$\cdots, x_p$ 的线性函数的不同取值和包括随机误差在内的其他因素的影响,这样可把 Q_H 分解成两部分:

$$Q_H = Q + Q_R,$$

其中

$$Q_R = (Y - 1\bar{Y}^T)^T X[X^T(I - \frac{1}{n}11^T)X]^{-1}X^T(Y - 1\bar{Y}^T)$$

反映了 $x_1, x_2, \cdots, x_p$ 的线性函数对 $y_1, y_2, \cdots, y_q$ 的影响;Q 是残差平方和矩阵,它是除了 $x_1, x_2, \cdots, x_p$ 的线性函数以外,其他因素(包括模型可能是非线性的)对 $y_1, y_2, \cdots, y_q$ 的影响.Q 和 Q_R 都是非负定矩阵.当 $x_1, x_2, \cdots, x_p$ 的线性函数影响大(Q_R 大),而其他因素影响小(Q 小)时,Λ 就小,就应否定假设 H.注意到 $Q \sim W_q(n - p - 1, V)$,Q 与 Q_R 独立,且当 H 成立时 $Q_R \sim W_q(p, V)$.所以当 H 成立时,Λ 是威尔克斯统计量.

2.1.3 回归诊断

当假设 H(见式(2-19))被否定时,还不能认为模型式(2-10)已经完全合用了.前面所做的参数估计和相关性的检验是在以下几个基本假定(或其中一部分)下做出的:

1° 回归函数是线性的,且包含了所有重要的自变量(假定式(2-10)和式(2-11));

2° 各次观测不相关,且为等协方差阵(假定式(2-12));

3° 正态性(假定式(2-18));

4° 自变量间不是线性相关的($\mathrm{rank}[1X] = p + 1$).

数据矩阵式(2-6)、(2-7)是否满足上述假设必须加以考察.回归诊断的任务就是研究这个问题,并采取改进措施.其内容包括残差分析、异常点的识别和剔除、数据变换、自变量选择等.回归分析就是"模型→统计推断→诊断→模型"这个过程的多次反复,最后得到一个合适的模型,并据此可对因变量的未来值作预报.

统计诊断是20世纪70年代中期发展起来的一个统计学分支.详细内容见文献[3]等.

2.1.4 偏最小二乘方法

偏最小二乘(partial least squares,简记为 PLS)是构造回归方程的一个较新方法.这个方法于20世纪80年代初出现在计量化学文献中,不久便引起统计学家的关注,并得到认可.为了建立回归方程,PLS方法先构造了称之为成分(因子或特征变量)的新变量,每个成分都是自变量的线性组合,其系数由自变量和因变量的数据共同确定;然后用通常的最小二乘方法建立因变量和这些成分间的回归方程.实际应用表明,当自变量个数多、样本量较少时,PLS方法很有效.到目前为止,PLS方法仅是一些算法.至于其有用性及优良性,理论上还没有给出明确的回答.

先介绍一个代数引理,它对解释 PLS 算法的统计意义很有用.

引理1 设 A 是 $m \times n$ 实矩阵.对 AA^T 作谱分解:

$$AA^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{P}\mathrm{diag}(\lambda_1^2,\lambda_2^2,\cdots,\lambda_r^2,0,0,\cdots,0)\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}},$$

其中 $\lambda_1^2 \geqslant \lambda_2^2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_r^2 > 0$ 是 AA^{T} 的所有非零特征根；$r = \mathrm{rank}A$；$\boldsymbol{P}$ 为 m 阶正交矩阵，其第 i 列 $\boldsymbol{p}_i$ 是相应于 λ_i^2 的特征向量，$i = 1,2,\cdots,r$；$\mathrm{diag}(\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_q)$ 表示以 $\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_q$ 为对角线元素的对角矩阵．有

1° $\boldsymbol{q}_i \overset{\mathrm{def}}{=\!=} \lambda_i^{-1}A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_i$ 是 $A^{\mathrm{T}}A$ 的相应于 λ_i^2 的特征向量，且 $\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_j = \delta_{ij}, i,j = 1,2,\cdots,r$ （注意 $A^{\mathrm{T}}A$ 与 AA^{T} 有相同的非零特征根）.

2° 取 n 阶正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$，其前 r 列分别是 $q_1,q_2,\cdots,q_r$，则有

$$A^{\mathrm{T}}A = \boldsymbol{Q}\mathrm{diag}(\lambda_1^2,\lambda_2^2,\cdots,\lambda_r^2,0,0,\cdots,0)\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}},$$

$$A = \boldsymbol{P}\begin{bmatrix} \boldsymbol{C} & 0 \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \end{bmatrix}\boldsymbol{Q}, \tag{2-22}$$

其中 $\boldsymbol{C} = \mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r) > 0$. 称式(2-22) 为 A 的奇异值分解．

3° 用 $\|\boldsymbol{a}\|$ 表示向量 $\boldsymbol{a}$ 的长度，即 $\|\boldsymbol{a}\| = (\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a})^{\frac{1}{2}}$，则有

$$\max_{\|a\|=\|b\|=1} |\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{b}| = \max_{\|a\|=\|b\|=1} \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{b} = \lambda_1,$$

且当 $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{b} = \boldsymbol{q}_1$ 时达到最大值．对于 $1 \leqslant k < r$，记

$$\mathscr{S}_{1,k} = \{\boldsymbol{a}: \boldsymbol{a} \in \boldsymbol{R}^m, \|\boldsymbol{a}\| = 1, \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_i = 0, \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{q}_i = 0, i = 1,2,\cdots,k\},$$

$$\mathscr{S}_{2,k} = \{\boldsymbol{b}: \boldsymbol{b} \in \boldsymbol{R}^n, \|\boldsymbol{b}\| = 1, \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_i = 0, \boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{b} = 0, i = 1,2,\cdots,k\},$$

则有

$$\max_{\substack{a\in\mathscr{S}_{1,k}\\ b\in\mathscr{S}_{2,k}}} |\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{b}| = \max_{\substack{a\in\mathscr{S}_{1,k}\\ b\in\mathscr{S}_{2,k}}} \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{b} = \lambda_{k+1},$$

且当 $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{p}_{k+1}, \boldsymbol{b} = \boldsymbol{q}_{k+1}$ 时达到最大值．

PLS 算法虽多种多样，但其中相当大的一部分实质上是一样的．下面介绍一种算法．

假定有 q 个因变量 $y_1,y_2,\cdots,y_q$ 和 m 个自变量 $x_1,x_2,\cdots,x_m$. 对它们作了 n 次观测，获得数据矩阵

$$\boldsymbol{Y} = \begin{bmatrix} y_{11} & \cdots & y_{1q} \\ \vdots & & \vdots \\ y_{n1} & \cdots & y_{nq} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{y}_1\ \boldsymbol{y}_2 \cdots \boldsymbol{y}_q],$$

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1m} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{x}_1\ \boldsymbol{x}_2 \cdots \boldsymbol{x}_m].$$

现要找一组 PLS 成分 $T_1,T_2,\cdots,T_p$，去产生一个好的经验回归方程（或称预报方程），即

$$\widehat{y}_k = \widehat{\beta}_{0k} + \widehat{\beta}_{1k}T_1 + \cdots + \widehat{\beta}_{pk}T_p \qquad (k = 1,2,\cdots,q), \tag{2-23}$$

其中 $T_1,T_2,\cdots,T_p$ 都是 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 的线性组合；$\widehat{\beta}_{jk}$ 是 β_{jk} 的最小二乘估计．

首先把 x_j 和 y_k 中心标准化：

$$V_{1j} = S_{x_j}^{-1/2}(x_j - \bar{x}_j) \qquad (j = 1,2,\cdots,m),$$

$$R_{1k} = S_{y_k}^{-1/2}(y_k - \bar{y}_k) \qquad (k = 1,2,\cdots,q),$$

其中

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{ij} = n^{-1}\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j;$$

$$S_{x_j} = \sum_{i=1}^{n}(x_{ij} - \bar{x}_j)^2 \qquad (j = 1,2,\cdots,m);$$

$$\bar{y}_k = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_{ik} = \frac{1}{n}\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_k;$$

$$S_{y_k} = \sum_{i=1}^{n}(y_{ik} - \bar{y}_k)^2 \qquad (k = 1,2,\cdots,q).$$

中心标准化后的数据矩阵为

$$\boldsymbol{R}_1 = \begin{bmatrix} S_{y_1}^{-\frac{1}{2}}(y_{11} - \bar{y}_1) & \cdots & S_{y_q}^{-\frac{1}{2}}(y_{1q} - \bar{y}_q) \\ \vdots & & \vdots \\ S_{y_1}^{-\frac{1}{2}}(y_{n1} - \bar{y}_1) & \cdots & S_{y_q}^{-\frac{1}{2}}(y_{nq} - \bar{y}_q) \end{bmatrix} = [\boldsymbol{r}_{11}\ \boldsymbol{r}_{12} \cdots \boldsymbol{r}_{1q}],$$

$$\boldsymbol{V}_1 = \begin{bmatrix} S_{x_1}^{-\frac{1}{2}}(x_{11} - \bar{x}_1) & \cdots & S_{x_m}^{-\frac{1}{2}}(x_{1m} - \bar{x}_m) \\ \vdots & & \vdots \\ S_{x_1}^{-\frac{1}{2}}(x_{n1} - \bar{x}_1) & \cdots & S_{x_m}^{-\frac{1}{2}}(x_{nm} - \bar{x}_m) \end{bmatrix} = [\boldsymbol{v}_{11}\ \boldsymbol{v}_{12} \cdots \boldsymbol{v}_{1m}].$$

显然 $\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_1 = \mathbf{0}^{\mathrm{T}}, \mathbf{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_1 = \mathbf{0}^{\mathrm{T}}$. 因此 $R_{11}, R_{12}, \cdots, R_{1q}, V_{11}, V_{12}, \cdots, V_{1m}$ 的样本均值都为零. $\boldsymbol{R}_1$ 和 $\boldsymbol{V}_1$ 不依赖于变量的度量单位和原点．

先找第一个 PLS 成分．找 $R_{11}, R_{12}, \cdots, R_{1q}$ 的一个线性组合和 $V_{11}, V_{12}, \cdots, V_{1m}$ 的一个线性组合，使这二者的样本协方差的绝对值达到最大，即要找 q 维单位向量 $\boldsymbol{c}_1$ 和 m 维单位向量 $\boldsymbol{d}_1$，使得

$$\boldsymbol{d}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{c}_1 = \max_{\|\boldsymbol{a}\|=\|\boldsymbol{b}\|=1} |\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{b}|. \tag{2-24}$$

根据引理 1，相应于 $\boldsymbol{R}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_1$ 的最大特征根的标准化特征向量就是所求的 $\boldsymbol{c}_1$（标准化向量指长度为 1 的向量）. 根据式(2-24)，$u_1 \overset{\text{def}}{=} (R_{11}, R_{12}, \cdots, R_{1q})\boldsymbol{c}_1$ 是因变量的一个重要代表，它与自变量的关系很密切（当 $q = 1$ 时，u_1 就是 R_{11} 本身）. u_1 的样本值（数据向量）为 $\boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{R}_1\boldsymbol{c}_1$. u_1 对每个 V_{1j} 依次作回归（用最小二乘估计，下同），获得经验回归方程

$$\hat{u}_{1j} = b_{1j}V_{1j},\ b_{1j} = \frac{\boldsymbol{v}_{1j}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_1}{\|\boldsymbol{v}_{1j}\|^2} \qquad (j = 1,2,\cdots,m),$$

其中 $\|\boldsymbol{v}_{ij}\|^2 = 1$，式中保留 $\|\boldsymbol{v}_{1j}\|^2$ 是为了与后面的相应公式保持一致．取第一

个 PLS 成分为

$$T_1 = \sum_{j=1}^{m} w_{1j}\widehat{u}_{1j} = \sum_{j=1}^{m} w_{1j} \frac{\boldsymbol{v}_{1j}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{c}_1}{\|\boldsymbol{v}_{1j}\|^2} V_{1j}. \tag{2-25}$$

其中 w_{1j} 是权．通常要求 $w_{1j} \geqslant 0$，且 $\sum_{j=1}^{m} w_{1j} = 1$. 约束条件 $\sum_{j=1}^{m} w_{1j} = 1$ 不是本质的．用非零常数乘 T_1 将不会影响其他成分的构造，以及对因变量的预报，因此只要求 $w_{1j} \geqslant 0$，且 $\sum_{j=1}^{m} w_{1j} > 0$. 后面在构造其他成分时对权的要求类似．权的取法将在后面给出．同理，不必要求 $\boldsymbol{c}_1$ 的长度为 1. 由 T_1 是 $V_{11}, V_{12}, \cdots, V_{1m}$ 的线性组合知，T_1 是 $x_1, x_2, \cdots, x_m$ 的线性函数，但必须注意，其系数的组成部分 b_{1j} 依赖因变量和自变量的数据矩阵．T_1 的样本值为

$$\boldsymbol{t}_1 = \sum_{j=1}^{m} w_{1j} b_{1j} \boldsymbol{v}_{1j} = \boldsymbol{V}_1 \mathrm{diag}\left(\frac{w_{11}}{\|\boldsymbol{v}_{11}\|^2}, \cdots, \frac{w_{1m}}{\|\boldsymbol{v}_{1m}\|^2}\right) \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{c}_1. \tag{2-26}$$

显然，T_1 的样本均值 $n^{-1}\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{t}_1 = 0$.

通常，T_1 没有包含自变量 $x_1, x_2, \cdots, x_m$ 的全部信息．不在 T_1 中的 x_j 的信息应在 $\boldsymbol{V}_{1j}$ 对 T_1 回归的残差中，这个残差为

$$V_{2j} = \boldsymbol{V}_{1j} - \frac{\boldsymbol{t}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_{1j}}{\|\boldsymbol{t}_1\|^2} T_1 \qquad (j = 1, 2, \cdots, m).$$

显然，V_{2j} 是 $x_1, x_2, \cdots, x_m$ 的线性函数，它的样本值为

$$\boldsymbol{v}_{2j} = \boldsymbol{v}_{1j} - \frac{\boldsymbol{t}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_{1j}}{\|\boldsymbol{t}_1\|^2}\boldsymbol{t}_1 = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_1)\boldsymbol{v}_{1j} \qquad (j = 1, 2, \cdots, m),$$

其中 $\boldsymbol{P}_1 = \frac{\boldsymbol{t}_1\boldsymbol{t}_1^{\mathrm{T}}}{\|\boldsymbol{t}_1\|^2}$ 是秩为 1 的投影矩阵(即对称幂等矩阵). $V_{21}, V_{22}, \cdots, V_{2m}$ 的数据矩阵为

$$\boldsymbol{V}_2 = [\boldsymbol{v}_{21}\ \boldsymbol{v}_{22} \cdots \boldsymbol{v}_{2m}] = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_1)\boldsymbol{V}_1.$$

类似地，因变量 $y_1, y_2, \cdots, y_q$ 也有信息存在于 R_{1k} 对 T_1 回归的残差中，这个残差为

$$R_{2k} = R_{1k} - \frac{\boldsymbol{r}_{1k}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{t}_1}{\|\boldsymbol{t}_1\|^2} T_1 \qquad (k = 1, 2, \cdots, q).$$

R_{2k} 的样本值为

$$\boldsymbol{r}_{2k} = \boldsymbol{r}_{1k} - \frac{\boldsymbol{r}_{1k}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{t}_1}{\|\boldsymbol{t}_1\|^2}\boldsymbol{t}_1 = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_1)\boldsymbol{r}_{1k} \qquad (k = 1, 2, \cdots, q).$$

$R_{21}, R_{22}, \cdots, R_{2q}$ 的数据矩阵为

$$\boldsymbol{R}_2 = [\boldsymbol{r}_{21}\ \boldsymbol{r}_{22} \cdots \boldsymbol{r}_{2q}] = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_1)\boldsymbol{R}_1.$$

用 $V_{2j}, \boldsymbol{V}_2, R_{2k}, \boldsymbol{R}_2$ 分别代替 $V_{1j}, \boldsymbol{V}_1, R_{1k}, \boldsymbol{R}_1$，用构造 T_1 的方法构造第二个成分，即

$$T_2 = \sum_{j=1}^{m} w_{2j} \frac{\boldsymbol{v}_{2j}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{c}_2}{\|\boldsymbol{v}_{2j}\|^2} V_{2j},$$

其中 c_2 是 $R_2^{\mathrm{T}}V_2V_2^{\mathrm{T}}R_2$ 的相应于最大特征根的特征向量，$\{w_{2j}, j = 1,2,\cdots,m\}$ 是权．T_2 也是 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 的线性函数．用非零常数乘 T_1 不改变 $V_{21},V_{22},\cdots,V_{2m}$ 和 $R_{21},R_{22},\cdots,R_{2q}$ 的值，因而不影响 T_2 的构造．T_2 的样本值

$$\begin{aligned} t_2 &= \sum_{j=1}^{m} w_{2j} \frac{v_{2j}^{\mathrm{T}} R_2 c_2}{\| v_{2j} \|^2} v_{2j} \\ &= V_2 \mathrm{diag}\left(\frac{w_{21}}{\| v_{21} \|^2}, \cdots, \frac{w_{2m}}{\| v_{2m} \|^2} \right) V_2^{\mathrm{T}} R_2 c_2. \end{aligned}$$

易知，T_2 的样本均值

$$n^{-1} \mathbf{1}^{\mathrm{T}} t_2 = 0;$$

T_1 和 T_2 的样本协方差

$$(n-1)^{-1} t_1^{\mathrm{T}} t_2 = 0.$$

一般地，假定已经确定了成分 $T_1,T_2,\cdots,T_i(i \geqslant 2)$，它们的样本均值都为零，且每两个的样本协方差为零．又假定已经确定了 $V_{ij}(j = 1,2,\cdots,m)$ 和 $R_{ik}(k = 1,2,\cdots,q)$．T_i，V_{ij} 和 R_{ik} 的样本值分别记为 t_i，v_{ij} 和 r_{ik}．现要确定 T_{i+1}．记

$$V_{(i+1)j} = V_{ij} - \frac{t_i^{\mathrm{T}} v_{ij}}{\| t_i \|^2} T_i \qquad (j = 1,2,\cdots,m).$$

$V_{(i+1)j}$ 是 V_{ij} 对 T_i 回归的残差，其样本值为

$$v_{(i+1)j} = (I - P_i) v_{ij} \qquad (j = 1,2,\cdots,m),$$

$$P_i = \frac{t_i t_i^{\mathrm{T}}}{\| t_i \|^2}.$$

$V_{(i+1)1},V_{(i+1)2},\cdots,V_{(i+1)m}$ 的数据矩阵为

$$V_{i+1} = (I - P_i) V_i.$$

R_{ik} 对 T_i 回归的残差为

$$R_{(i+1)k} = R_{ik} - \frac{t_i^{\mathrm{T}} r_{ik}}{\| t_i \|^2} T_i \qquad (k = 1,2,\cdots,q).$$

$R_{(i+1)k}$ 的样本值为

$$r_{i+1} = (I - P_i) r_{ik} \qquad (k = 1,2,\cdots,q).$$

于是 $R_{(i+1)1},R_{(i+1)2},\cdots,R_{(i+1)q}$ 的数据矩阵为

$$R_{i+1} = (I - P) R_i.$$

类似于 T_1 的构造法，第 $i+1$ 个成分取为

$$T_{i+1} = \sum_{j=1}^{m} w_{(i+1)j} \frac{v_{(i+1)j}^{\mathrm{T}} R_{i+1} c_{i+1}}{\| v_{(i+1)j} \|^2} V_{(i+1)j},$$

其中 c_{i+1} 是 $R_{i+1}^{\mathrm{T}} V_{i+1} V_{i+1}^{\mathrm{T}} R_{i+1}$ 的相应于最大特征根的特征向量；$\{w_{(i+1)j}; j = 1,2,\cdots,m\}$ 是权．显然，用非零常数乘 T_i 不影响 T_{i+1} 的构造．T_{i+1} 也是 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 的线性函数．它的样本值为

$$t_{i+1} = V_{i+1} \mathrm{diag}\left(\frac{w_{(i+1)1}}{\| v_{(i+1)1} \|^2}, \cdots, \frac{w_{(i+1)m}}{\| v_{(i+1)m} \|^2} \right) V_{i+1}^{\mathrm{T}} R_{i+1} c_{i+1}.$$

PLS成分个数的确定放在本小节末讨论．假定 p 个PLS成分 $T_1,T_2,\cdots,T_p$ 已经够用．为了建立经验方程式(2-23)及简化前面的计算，下面先列举 t_i、V_i 和 R_i 的一些性质．

1° $t_1,t_2,\cdots,t_p$ 两两正交，即

$$t_i^{\mathrm T}t_j=0\qquad (i\neq j).$$

此外，T_i 的样本均值

$$n^{-1}\mathbf{1}^{\mathrm T}t_i=0\qquad (i=1,2,\cdots,p).$$

因此，$T_1,T_2,\cdots,T_p$ 的任两个的样本协方差为零．

2° $r_{(i+1)k}$ 和 $v_{(i+1)j}$ 分别是 R_{1k} 和 V_{1j} 对 $T_1,T_2,\cdots,T_i$ 回归的残差向量，$i=1,2,\cdots,p-1,k=1,2,\cdots,q,j=1,2,\cdots,m$.

3° $t_j^{\mathrm T}V_{i+1}=0\qquad (i=1,2,\cdots,p-1;j=1,2,\cdots,i)$.

4° $R_i^{\mathrm T}V_i=R_1^{\mathrm T}V_i=R_i^{\mathrm T}V_1\qquad (i=2,3,\cdots,p)$,

$$R_{i+1}=\Big(I-\sum_{j=1}^{i}P_j\Big)R_1\qquad (i=1,2,\cdots,p-1),$$

$$V_{i+1}=\Big(I-\sum_{j=1}^{i}P_j\Big)V_1\qquad (i=1,2,\cdots,p-1),$$

其中

$$P_i=\frac{t_it_i^{\mathrm T}}{\|t_i\|^2}.$$

由此可知 c_i 是 $R_1^{\mathrm T}V_iV_i^{\mathrm T}R_1$ 的相应于最大特征根的特征向量，$T_i(i\geqslant 2)$ 中的因子 $v_{ij}^{\mathrm T}R_i=v_{ij}^{\mathrm T}R_1$．因此，在构造PLS成分过程中不需计算 $R_{ik}(i=2,3,\cdots,p;k=1,2,\cdots,q)$ 和 $R_2,R_3,\cdots,R_p$.

由性质1°即得式(2-23)中参数 β_{jk} 的最小二乘估计为

$$\begin{aligned}\widehat{\beta}_{0k}&=\bar{y}_k,\\ \widehat{\beta}_{jk}&=\frac{t_j^{\mathrm T}y_k}{\|t_j\|^2}\qquad (k=1,2,\cdots,q;j=1,2,\cdots,p).\end{aligned}\tag{2-27}$$

上式表明，β_{jk} 的估计 $\widehat{\beta}_{jk}$ 等于 y_k 对单个 T_j 回归的最小二乘估计；当一些成分附加到模型时，早先成分的系数的最小二乘估计不变．

由式(2-27)得到预报方程：

$$(\widehat{y}_1,\widehat{y}_2,\cdots,\widehat{y}_q)=(1,T_1,T_2,\cdots,T_p)(z_0,z_1,\cdots,z_p)^{\mathrm T},\tag{2-28}$$

其中

$$z_0=(\bar{y}_1,\bar{y}_2,\cdots,\bar{y}_q)^{\mathrm T};$$

$$z_i=\frac{Y^{\mathrm T}t_i}{\|t_i\|^2}\qquad (i=1,2,\cdots,p).$$

由此可知，用非零常数乘 T_i 不改变预报方程．

由 T_i 的构造可知，预报方程式(2-28)右边不是 Y 的线性函数．而基于通常最小二乘估计的预报则是 Y 的线性函数．

如前所述，$T_1,T_2,\cdots,T_p$ 都是 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 的线性组合，因此，方程式(2-28)右

边中 $T_1,T_2,\cdots,T_p$ 可直接用原变量 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 表示，这对于用 $x_1,x_2,\cdots,x_m$ 来预报 $(y_1,y_2,\cdots,y_q)$ 更为方便．

权 $\{w_{ij},j=1,2,\cdots,m\},i=1,2,\cdots,p$ 的两种常用取法：

(1) $w_{ij}=\|\boldsymbol{v}_{ij}\|^2$，它与 V_{ij} 的样本方差成正比．这是最常用的取法．采用这种取法的理由是：因 $\boldsymbol{v}_{ij}(i\geqslant 2)$ 是 V_{1j} 对 $T_1,T_2,\cdots,T_{i-1}$ 线性回归的残差向量，故当 V_{ij} 的样本方差相对于 v_{1j} 的样本方差(等于1)小时，V_{ij} 近似地与 $T_1,T_2,\cdots,T_{i-1}$ 共线，因而 V_{ij} 对 T_i 的贡献应该小，也就是说 w_{ij} 应该取小的值．在这种取法下，

$$T_i=\sum_{j=1}^{m}(\boldsymbol{v}_{ij}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{c}_i)V_{ij},$$

$$\boldsymbol{t}_i=\boldsymbol{V}_i\boldsymbol{V}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{c}_i.$$

(2) $w_{ij}=1/m,i=1,2,\cdots,p,j=1,2,\cdots,m$．这种等加权是自然的．

剩下的问题是成分个数 p 的确定．这是个棘手问题．通常采用交叉论证法，其做法如下：将数据分成若干组，通常分为3组较适当．每次删去一组，用其他组的数据构造PLS成分并确定经验回归方程．用这个方程预报被删去的那组的 $y_1,y_2,\cdots,y_q$，计算预报值与实际值的误差平方和．反复实施这种做法直到每组被删去一次为止．把每组的预报误差平方和加起来，其结果称为总的预报误差平方和．不断附加PLS成分到回归模型中，直到下一个PLS成分将增加总的预报误差平方和为止．

2.2 典型相关分析

设 p 维随机向量 $\boldsymbol{x}$ 和 q 维随机向量 $\boldsymbol{y}$ 是相依的．典型相关分析从另一角度研究它们之间的线性相关性．设 $(\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}},\boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}},(\boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}},\boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}},\cdots,(\boldsymbol{x}_n^{\mathrm{T}},\boldsymbol{y}_n^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$ 是来自 $(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$ 的独立同分布样本．记

$$\boldsymbol{S}_x=\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i-\overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i-\overline{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}},\quad \overline{\boldsymbol{x}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i,$$

$$\boldsymbol{S}_y=\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{y}_i-\overline{\boldsymbol{y}})(\boldsymbol{y}_i-\overline{\boldsymbol{y}})^{\mathrm{T}},\quad \overline{\boldsymbol{y}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{y}_i,$$

$$\boldsymbol{S}_{xy}=\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i-\overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{y}_i-\overline{\boldsymbol{y}})^{\mathrm{T}},$$

则 $\boldsymbol{x}$ 的两个线性函数 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 的样本协方差为 $(n-1)^{-1}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_x\boldsymbol{c}$，线性函数 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 和线性函数 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 的样本协方差为 $(n-1)^{-1}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{xy}\boldsymbol{b}$．以下假定 $\boldsymbol{S}_x$ 和 $\boldsymbol{S}_y$ 都是正定的．于是 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 的样本相关系数为

$$\rho(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})=\frac{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{xy}\boldsymbol{b}}{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_x\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_y\boldsymbol{b})^{\frac{1}{2}}},\tag{2-29}$$

它在一定程度上反映了 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的线性相关性．

若 $\boldsymbol{a}_1\in\mathbf{R}^p,\boldsymbol{b}_1\in\mathbf{R}^q$ 满足 $\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_x\boldsymbol{a}_1=1,\boldsymbol{b}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_y\boldsymbol{b}_1=1$，且

$$\rho(\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) = \max_{\substack{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}S_x\boldsymbol{a}=1\\ \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}S_y\boldsymbol{b}=1}} \rho(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) \overset{\mathrm{def}}{=\!=} \rho_1, \tag{2-30}$$

则称 $\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{b}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 为第一对样本典型相关变量,称 ρ_1 为第一个样本典型相关系数.

若

$$(\boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}},\boldsymbol{b}_2^{\mathrm{T}}) \in \mathscr{S}_2 = \{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}):\boldsymbol{a}\in\mathbf{R}^p,\boldsymbol{b}\in\mathbf{R}^q,\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}S_x\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}S_y\boldsymbol{b} = 1,$$
$$\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}S_x\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}S_{xy}\boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}S_{xy}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}S_y\boldsymbol{b}_1 = 0\},$$

且

$$\rho(\boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) = \max_{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}})\in\mathscr{S}_2} \rho(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) \overset{\mathrm{def}}{=\!=} \rho_2, \tag{2-31}$$

则称 $\boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{b}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 为第二对样本典型相关变量,称 ρ_2 为第二个样本典型相关系数.

一般地,若$(\boldsymbol{a}_k^{\mathrm{T}},\boldsymbol{b}_k^{\mathrm{T}})$属于

$$\mathscr{S}_k = \{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}):\boldsymbol{a}\in\mathbf{R}^p,\boldsymbol{b}\in\mathbf{R}^q,\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}S_x\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}S_y\boldsymbol{b} = 1,$$
$$\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}S_x\boldsymbol{a}_i = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}S_{xy}\boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}S_{xy}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}S_y\boldsymbol{b}_i = 0, i = 1,2,\cdots,k-1\},$$

且

$$\rho(\boldsymbol{a}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) = \max_{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}})\in\mathscr{S}_k} \rho(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) \overset{\mathrm{def}}{=\!=} \rho_k, \tag{2-32}$$

则称 $\boldsymbol{a}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{b}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 为第 k 对样本典型相关变量,称 ρ_k 为第 k 个样本典型相关系数,$k = 2,3,\cdots,r$, $r = \mathrm{rank}\,S_{xy}$.

从上述定义可知,第一对样本典型相关变量和第一个样本典型相关系数在刻画 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的线性相关性方面最重要,第二对样本典型相关变量和第二个样本典型相关系数次之,如此类推.此外,第 i 对样本典型相关变量与第 $j(j\neq i)$ 对样本典型相关变量的样本协方差阵为零矩阵,也就是说,不同的典型相关变量对是不相关的,因此,头几对典型相关变量就几乎可以描述 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 之间的相互关系.

样本典型相关变量和系数一定存在.它们的求法如下.

把 $\rho(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})$ 改写成

$$\rho(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) = \frac{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}S_x^{\frac{1}{2}}(S_x^{-\frac{1}{2}}S_{xy}S_y^{-\frac{1}{2}})S_y^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{b}}{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}S_x\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}S_y\boldsymbol{b})^{\frac{1}{2}}}. \tag{2-33}$$

当 $p\leqslant q$ 时,对 $S_x^{-\frac{1}{2}}S_{xy}S_y^{-1}S_{xy}^{\mathrm{T}}S_x^{-\frac{1}{2}}$ 作谱分解:

$$S_x^{-\frac{1}{2}}S_{xy}S_y^{-1}S_{xy}^{\mathrm{T}}S_x^{-\frac{1}{2}} = C\mathrm{diag}(\lambda_1^2,\lambda_2^2,\cdots,\lambda_r^2,0,0,\cdots,0)C^{\mathrm{T}}, \tag{2-34}$$

其中 C 为 p 阶正交矩阵,其第 i 列记为 $\boldsymbol{c}_i$;$\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_r>0$.依引理1,$\boldsymbol{c}_i^{\mathrm{T}}S_x^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{x}$ 和 $\lambda_i^{-1}\boldsymbol{c}_i^{\mathrm{T}}S_x^{-\frac{1}{2}}S_{xy}S_y^{-1}\boldsymbol{y}$ 为第 i 对样本典型相关变量,λ_i 为第 i 个样本典型相关系数,$i = 1,2,\cdots,r$.

当 $p>q$ 时,下述求样本典型相关变量和典型相关系数的方法可减少一些计算量,而所得结果相同.对 $S_y^{-\frac{1}{2}}S_{xy}^{\mathrm{T}}S_x^{-1}S_{xy}S_y^{-\frac{1}{2}}$ 作谱分解:

$$S_y^{-\frac{1}{2}}S_{xy}^{\mathrm{T}}S_x^{-1}S_{xy}S_y^{-\frac{1}{2}} = \boldsymbol{F}\mathrm{diag}(\lambda_1^2,\lambda_2^2,\cdots,\lambda_r^2,0,0,\cdots,0)\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}, \tag{2-35}$$

其中 $\boldsymbol{F}$ 为 q 阶正交矩阵，其第 i 列记为 $\boldsymbol{f}_i$；$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_r > 0$. 依引理 1，$\lambda_i^{-1}\boldsymbol{f}_i^{\mathrm{T}}S_y^{-\frac{1}{2}}S_{xy}^{\mathrm{T}}S_x^{-1}\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{f}_i^{\mathrm{T}}S_y^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{y}$ 为第 i 对样本典型相关变量，λ_i 为第 i 个样本典型相关系数，$i = 1,2,\cdots,r$.

用 V_x 和 V_y 分别表示 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的协方差阵，用 V_{xy} 表示 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 间的协方差阵．当 $V_x > 0$，$V_y > 0$ 和 V_{xy} 已知时，用它们分别代替式(2-29) ~ 式(2-35) 中的 S_x，S_y，S_{xy}，并用同样的方法可定义并求得总体的典型相关变量和典型相关系数．当 V_x，V_y 和 V_{xy} 未知时，用样本典型相关变量和样本典型相关系数作为总体相应量的估计．

3　主成分分析和因子分析

3.1　主成分分析

在许多实际问题中，人们往往要与高维数据打交道．维数过高将给数据分析带来困难．于是人们利用数据分量间的相依性设法把维数降低，而又不要丢失数据的过多信息．霍特林在 1933 年提出的**主成分**分析就是这些方法中的一种．

在阐述主成分分析中需要用到下述的代数引理．

引理 1　设 $\boldsymbol{A}$ 是 m 阶非负定矩阵．对 $\boldsymbol{A}$ 作谱分解：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r,0,0,\cdots,0)\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}},$$

其中 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_r > 0$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的非零特征根，$r = \mathrm{rank}\boldsymbol{A}$，正交矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的第 i 列 $\boldsymbol{p}_i$ 是相应于 λ_i($\lambda_i = 0$，$i = r+1,r+2,\cdots,m$) 的特征向量，则有

$\max\limits_{\|\boldsymbol{a}\|=1} \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{a} = \lambda_1$，且最大值在 $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{p}_1$ 处达到；

$\max\limits_{\substack{\|\boldsymbol{a}\|=1 \\ \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_i=0 \\ i=1,\cdots,k}} \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{a} = \lambda_{k+1}$，且最大值在 $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{p}_{k+1}$ 处达到($k = 1,2,\cdots,r-1$).

当 $\boldsymbol{a}$ 满足 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_i = 0$，$i = 1,2,\cdots,r$ 时，必有 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{a} = 0$.

3.1.1　总体主成分

设 $\boldsymbol{y}$ 是 m 维随机向量，其均值为 $\boldsymbol{\mu}$，协方差阵为 V，则 $\boldsymbol{y}$ 的线性组合 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 的方差为 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}V\boldsymbol{a}$.

若 $\boldsymbol{y}$ 的标准化线性组合 $\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$(标准化意为 $\|\boldsymbol{a}_1\| = 1$) 的方差在 $\boldsymbol{y}$ 的标准化线性组合的方差中达到最大，即

$$\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}V\boldsymbol{a}_1 = \max_{\|\boldsymbol{a}\|=1} \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}V\boldsymbol{a},$$

则称 $\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 为 $\boldsymbol{y}$ 的**第一(总体)主成分**．

若 y 的标准化线性组合 $a_2^{\mathrm{T}}y$ 与 $a_1^{\mathrm{T}}y$ 不相关(即 $a_2^{\mathrm{T}}Va_1=0$),且在与 $a_1^{\mathrm{T}}y$ 不相关的 y 的标准化线性组合中,$a_2^{\mathrm{T}}y$ 的方差达到最大,即

$$a_2^{\mathrm{T}}Va_2=\max_{\substack{\|a\|=1\\ a^{\mathrm{T}}Va_1=0}}a^{\mathrm{T}}Va,$$

则称 $a_2^{\mathrm{T}}y$ 为 y 的第二主成分.

一般地,设 $a_1^{\mathrm{T}}y,a_2^{\mathrm{T}}y,\cdots,a_k^{\mathrm{T}}y$ 是 y 的头 $k(k\geqslant 1)$ 个主成分,若

$$a_{k+1}\in\mathscr{S}_k\xlongequal{\text{def}}\{a:a\in\mathbf{R}^m,\|a\|=1,a^{\mathrm{T}}Va_i=0,i=1,2,\cdots,k\},$$

且

$$a_{k+1}^{\mathrm{T}}Va_{k+1}=\max_{a\in\mathscr{S}_k}a^{\mathrm{T}}Va,$$

则称 $a_{k+1}^{\mathrm{T}}y$ 为 y 的第$(k+1)$主成分.

当 V 已知时,利用引理1可获得主成分及其方差.对 V 作谱分解:

$$V=A\,\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m)A^{\mathrm{T}},$$

其中 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_r>0,\lambda_{r+1}=\cdots=\lambda_m=0,\lambda_i$ 是 V 的特征根;A 是 m 阶正交矩阵,其第 j 列 a_j 是相应于 λ_j 的特征向量;$r=\mathrm{rank}\,V$.根据引理1,$a_i^{\mathrm{T}}y$ 是 y 的第 i 主成分,其方差为 $\lambda_i,i=1,2,\cdots,r$;当 $a^{\mathrm{T}}Va_i=0,i=1,2,\cdots,r$ 时,$\mathrm{var}\,a^{\mathrm{T}}y=a^{\mathrm{T}}Va=0$.注意到 $\sum\limits_{i=1}^{r}\mathrm{var}(a_i^{\mathrm{T}}y)=\sum\limits_{i=1}^{r}\lambda_i=\mathrm{tr}V$,而 $\mathrm{tr}V$ 是 y 的"总方差",即

$$\mathrm{tr}V=\sum_{i=1}^{m}\mathrm{var}\,y_i,$$

其中 y_i 是 y 的第 i 个分量,它是 y 的总变化性的一个度量.因此 $a_1^{\mathrm{T}}y,a_2^{\mathrm{T}}y,\cdots,a_r^{\mathrm{T}}y$ 包含了 y 的变化性的全部信息,可以用 $x=(a_1,a_2,\cdots,a_r)^{\mathrm{T}}y$ 代替 y 而达到降维的目的.当 $i\neq j$ 时,$a_i^{\mathrm{T}}Va_j=0$,且 $a_i^{\mathrm{T}}a_j=0$,因此不同的主成分在统计意义下是正交的(不相关),在几何意义下也是正交的.用 a_i 的方向作为新直角坐标系的第 i 个坐标的方向,$i=1,2,\cdots,m$,则 x 的分量就是 y 在这个新坐标系下的前 r 个坐标.若对于某个小的自然数 k,有 $\sum\limits_{i=1}^{k}\lambda_i$ 接近于 $\mathrm{tr}V$,则头 k 个主成分包含了 y 的变化性的大部分信息,可用前 k 个主成分来代表 y.

3.1.2　样本主成分

m 维向量 y 的协方差阵 V 通常是未知的.需要由样本给出总体主成分的估计.设 $y_1,y_2,\cdots,y_n$ 是来自 y 的独立同分布样本.记

$$\overline{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i,$$

$$\widehat{V}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(y_i-\overline{y})(y_i-\overline{y})^{\mathrm{T}}}{n-1}\qquad(\text{样本协方差}).\tag{3-1}$$

用 $\widehat{V}$ 作为 V 的估计.对 $\widehat{V}$ 作谱分解:

$$\widehat{V} = \widehat{A}\mathrm{diag}(\widehat{\lambda}_1, \widehat{\lambda}_2, \cdots, \widehat{\lambda}_m)\widehat{A}^{\mathrm{T}}. \tag{3-2}$$

其中 $\widehat{\lambda}_1 \geqslant \widehat{\lambda}_2 \geqslant \cdots \geqslant \widehat{\lambda}_m \geqslant 0$ 是 $\widehat{V}$ 的特征根；$\widehat{A}$ 是正交矩阵，其第 i 列 $\widehat{a}_i$ 是相应于 $\widehat{\lambda}_i$ 的特征向量．取 $\widehat{a}_i^{\mathrm{T}}y$ 作为第 i 总体主成分的估计，并称之为第 i **样本主成分**．$\widehat{a}_i^{\mathrm{T}}y$ 的样本方差为 $\widehat{a}_i^{\mathrm{T}}Va_i = \widehat{\lambda}_i$，用 $\widehat{\lambda}_i$ 作为第 i 总体主成分的方差的估计．由式(3-2)可知，当 $i \neq j$ 时，$\widehat{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{a}_j = 0$，且 $\widehat{a}_i^{\mathrm{T}}y$ 与 $\widehat{a}_j^{\mathrm{T}}y$ 的样本协方差 $\widehat{a}_i^{\mathrm{T}}V\widehat{a}_j = 0$. 若对于自然数 k $(k < m)$，有 $\sum_{i=1}^{k}\widehat{\lambda}_i \Big/ \sum_{i=1}^{m}\widehat{\lambda}_i$ 接近于1. 则可用 $x = (\widehat{a}_1, \widehat{a}_2, \cdots, \widehat{a}_k)^{\mathrm{T}}y$ 代表 y.

3.1.3 从相关阵出发的主成分分析

当 m 维随机向量 y 的各个分量的度量单位作不同改变时，y 的协方差阵的特征根和特征向量将随之改变．因此，只有当 y 的各分量的度量单位相同时，从协方差阵出发的主成分分析才会更有意义．当 y 的各分量的度量单位不相同时，从协方差阵出发有可能使重要分量与不重要分量的作用颠倒，而从相关矩阵出发就可避免出现这些问题．记

$$r_{ij} = \frac{v_{ij}}{(v_{ii}v_{jj})^{\frac{1}{2}}} \qquad (i, j = 1, 2, \cdots, m),$$

其中 v_{ij} 是 y 的协方差阵 V 的 (i, j) 元，则

$$R = \begin{bmatrix} 1 & r_{12} & \cdots & r_{1m} \\ r_{21} & 1 & \cdots & r_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ r_{m1} & r_{m2} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

就是 y 的相关矩阵．当 y 的分量的度量单位改变时，R 不改变．R 是 y 的标准化向量

$$y^* = \mathrm{diag}(v_{11}^{-\frac{1}{2}}, v_{22}^{-\frac{1}{2}}, \cdots, v_{mm}^{-\frac{1}{2}})y$$

的协方差阵．当 V 已知时，对 R 作谱分解，

$$R = B\mathrm{diag}(\tau_1, \tau_2, \cdots, \tau_m)B^{\mathrm{T}},$$

其中 $\tau_1 \geqslant \tau_2 \geqslant \cdots \geqslant \tau_m \geqslant 0$ 是 R 的特征根；B 是正交矩阵，其第 j 列 b_j 是相应于 τ_j 的特征向量，则

$$x_j^* = b_j^{\mathrm{T}}y^* = b_j^{\mathrm{T}}\mathrm{diag}(v_{11}^{-\frac{1}{2}}, v_{22}^{-\frac{1}{2}}, \cdots, v_{mm}^{-\frac{1}{2}})y$$

是 y^* 的第 j 主成分，$j = 1, 2, \cdots, m$. 主成分 x_i^* 仍然具有如下性质.

当 $i \neq j$ 时，x_i^* 和 x_j^* 在统计意义下是正交的 $(\mathrm{cov}(x_i^*, x_j^*) = 0)$，在几何意义下也是正交的 $(b_i^{\mathrm{T}}b_j = 0)$. x_i^* 的方差为 τ_i，$i = 1, 2, \cdots, m$.

当 V 未知时，需要由样本来估计相关矩阵．设 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 是来自 y 的独立同分布样本，则样本相关矩阵为

$$\widehat{R}=\begin{bmatrix}1 & \widehat{r}_{12} & \cdots & \widehat{r}_{1m}\\ \widehat{r}_{21} & 1 & \cdots & \widehat{r}_{2m}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \widehat{r}_{m1} & \widehat{r}_{m2} & \cdots & 1\end{bmatrix},$$

其中 $\widehat{r}_{ij}=\widehat{v}_{ij}/(\widehat{v}_{ii}\widehat{v}_{jj})^{\frac{1}{2}}$，$\widehat{v}_{ij}$是样本协方差阵$\widehat{\boldsymbol{V}}$(见式(3-1))的$(i,j)$元，$i,j=1,2,\cdots,m$. 对$\widehat{\boldsymbol{R}}$作谱分解：

$$\widehat{\boldsymbol{R}}=\widehat{\boldsymbol{B}}\mathrm{diag}(\widehat{\tau}_1,\widehat{\tau}_2,\cdots,\widehat{\tau}_m)\widehat{\boldsymbol{B}}^{\mathrm{T}},$$

其中$\widehat{\tau}_1\geqslant\widehat{\tau}_2\geqslant\cdots\geqslant\widehat{\tau}_m\geqslant0$是$\widehat{\boldsymbol{R}}$的特征根，$\widehat{\boldsymbol{B}}$是正交矩阵，其第$j$列$\widehat{\boldsymbol{b}}_j$是相应于$\widehat{\tau}_j$的特征向量，则

$$\widehat{\boldsymbol{b}}_j^{\mathrm{T}}\mathrm{diag}(\widehat{v}_{11}^{-\frac{1}{2}},\widehat{v}_{22}^{-\frac{1}{2}},\cdots,\widehat{v}_{mm}^{-\frac{1}{2}})\boldsymbol{y}$$

是第j样本主成分，其样本方差为$\widehat{\tau}_j$.

与前两小节类似，可以用前几个主成分来代表$\boldsymbol{y}^*$.

3.2　因子分析

因子分析是简化、分析高维数据的另一种统计方法．例如，假定想考核高中学生升大学的能力，给他(她)们出了50道题．这些题目可分成三类：语言类、数学类和艺术类．人们称这些类为公共因子，分别记之为f_1、f_2和f_3．于是学生回答第i个问题的得分可表示成

$$y_i=\mu_i+a_{i1}f_1+a_{i2}f_2+a_{i3}f_3+e_i\qquad(i=1,2,\cdots,50),$$

其中e_i是特殊因子，它仅对第i道题起作用．这种描述智力测验得分的因子分析模型由斯皮尔曼于1904年首先提出，当时他的模型仅包含一个公共因子．

一般地，假定可观测的p维随机向量$\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_p)^{\mathrm{T}}$可表示成

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{f}+\boldsymbol{e},\tag{3-3}$$

其中$\boldsymbol{f}=(f_1,f_2,\cdots,f_q)^{\mathrm{T}}$是不可观测的$q(q\leqslant p)$维随机向量，它的元素称为公共因子，它们对$\boldsymbol{y}$的每个分量都起作用；$\boldsymbol{e}=(e_1,e_2,\cdots,e_p)^{\mathrm{T}}$是不可观测的$p$维随机向量，每个$e_i$都称为特殊因子，$e_i$仅对$y_i$起作用；$\boldsymbol{\mu}$和$\boldsymbol{A}$分别是$p\times1$和$p\times q$参数矩阵．进一步假定

$$\begin{cases}E\boldsymbol{y}=\boldsymbol{\mu},\quad E\boldsymbol{f}=\boldsymbol{0},\quad E\boldsymbol{f}\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}_q,\\ E\boldsymbol{e}=\boldsymbol{0},\quad E\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}=\mathrm{diag}(\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_p)\xlongequal{\mathrm{def}}\boldsymbol{\Psi},\quad E\boldsymbol{f}\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}=0.\end{cases}\tag{3-4}$$

带有假定式(3-4)的模型式(3-3)称为正交因子模型．此时，$\boldsymbol{y}$的协方差矩阵为

$$V = \begin{bmatrix} v_{11} & \cdots & v_{1p} \\ \vdots & & \vdots \\ v_{p1} & \cdots & v_{pp} \end{bmatrix} = AA^{T} + \Psi.$$

称矩阵

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1q} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{p1} & \cdots & a_{pq} \end{bmatrix}$$

为因子负荷矩阵，其元素 a_{ij} 称为第 j 个变量 y_i 在第 i 个因子 f_j 上的负荷．注意到

$$\mathrm{var} y_i = v_{ii} = h_i^2 + \psi_i,$$

其中
$$h_i^2 = \sum_{j=1}^{q} a_{ij}^2.$$

所以，当 $h_i^2 > \psi_i$ 时，公共因子的影响大于特殊因子 e_i 的影响；当 $\varphi_i > h_i^2$ 时，特殊因子 e_i 的影响大于公共因子的影响．$g_j^2 \xlongequal{\mathrm{def}} \sum_{i=1}^{p}(a_{ij}^2/v_{ii})$ 越大，表明公共因子 f_j 对 y 的影响越大，g_j^2 是 f_j 重要性的一个度量．

对于 p 维对角矩阵 $D = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_p)$，$d_i > 0$ 是常数，$y^* = Dy$ 意味着 y^* 是 y 各分量改变度量单位的结果．由式(3-3)得

$$y^* = D\mu + DAf + De = \mu^* + A^* f + e^*, \tag{3-5}$$

其中

$$\mu^* = D\mu;\quad A^* = DA;\quad e^* = De.$$

显然 y^*，f 和 e^* 也满足式(3-4)，更确切地，

$Ey^* = \mu^*$，　$Ef = 0$，　$Eff^{T} = I_q$，

$Ee^* = 0$，　$Efe^{*T} = 0$，

$Ee^* e^{*T} = D\Psi D \xlongequal{\mathrm{def}} \Psi^* = \mathrm{diag}(\psi_1^*, \varphi_2^*, \cdots, \psi_p^*)$，　$\psi_i^* = d_i^2\psi_i$.

当 $d_i = v_{ii}^{-\frac{1}{2}}$，$i = 1, 2, \cdots, p$ 时，y^* 的协方差阵就是 y 的相关矩阵，因此，为了消除 y 的各分量度量单位不同的影响，下面将从样本相关矩阵出发讨论问题．

设 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 是来自 y 的独立同分布样本，希望找到公共因子较少的一个正交因子模型式(3-3)，使得它能较好地拟合数据和解释数据．这包括确定因子个数 q、因子负荷矩阵 A 和特殊因子的方差 ψ_i，并依据 A 对公共因子的实际含义作出解释．

解决这个问题主要有两种方法：第一种是主成分方法；第二种是在正态分布假定下给出 μ，A 和 ψ 的极大似然估计方法．后一种方法可参考文献[4]，这里仅介绍主成分方法．

y 的样本相关矩阵为

$$\widehat{R}=\begin{bmatrix}1 & \widehat{r}_{12} & \cdots & \widehat{r}_{1p}\\ \widehat{r}_{21} & 1 & \cdots & \widehat{r}_{2p}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ r_{p1} & \widehat{r}_{p2} & \cdots & 1\end{bmatrix},$$

其中

$$\widehat{r}_{ij}=\frac{\widehat{v}_{ij}}{(\widehat{v}_{ii}\widehat{v}_{jj})^{\frac{1}{2}}}=\frac{s_{ij}}{(s_{ii}s_{jj})^{\frac{1}{2}}},$$

$\widehat{v}_{ij}$ 和 s_{ij} 分别是

$$\widehat{V}=(n-1)^{-1}\sum_{j=1}^{n}(y_j-\overline{y})(y_j-\overline{y})^{\mathrm{T}},$$

$$S=(n-1)\widehat{V}$$

的 (i,j) 元，其中 $\overline{y}=n^{-1}\sum_{j=1}^{n}y_j$. 为简便计，$y$ 的标准化向量 $Z=\mathrm{diag}(\widehat{v}_{11}^{-\frac{1}{2}},\widehat{v}_{22}^{-\frac{1}{2}},\cdots,\widehat{v}_{pp}^{-\frac{1}{2}})y$ 的分解式仍然用式(3-3) 和式(3-4) 中的符号表示，即

$$Z=\mu+Af+e,$$

Z 的样本协方差就是 $\widehat{R}$. 这样问题转化为要从 $\widehat{R}$ 出发找出公共因子数 q，并给出 A 和 ψ_i 的估计 $\widehat{A}$ 和 $\widehat{\varphi}_i$. 这些估计应尽可能满足

$$\widehat{R}=\widehat{A}\widehat{A}^{\mathrm{T}}+\psi, \tag{3-6}$$

其中 $\widehat{\psi}=\mathrm{diag}(\widehat{\psi}_1,\widehat{\varphi}_2,\cdots,\widehat{\psi}_p)$. 对 $\widehat{R}$ 作谱分解：

$$\widehat{R}=\widehat{B}\mathrm{diag}(\widehat{\lambda}_1,\widehat{\lambda}_2,\cdots,\widehat{\lambda}_p)\widehat{B}^{\mathrm{T}},$$

其中 $\widehat{\lambda}_1\geqslant\widehat{\lambda}_2\geqslant\cdots\geqslant\widehat{\lambda}_p\geqslant 0$ 是 $\widehat{R}$ 的特征根，正交矩阵 B 的第 i 列 $\widehat{b}_i$ 是相应于 $\widehat{\lambda}_i$ 的特征向量. 如果取 $q=p$, $\widehat{A}=\widehat{B}\mathrm{diag}(\sqrt{\widehat{\lambda}_1},\sqrt{\widehat{\lambda}_2},\cdots,\sqrt{\widehat{\lambda}_p})$ 和 $\widehat{\Psi}=0$，则式(3-6) 等号成立，公共因子个数等于 y 的维数，特殊因子 $e\equiv 0$. 这种做法起不到简化数据和解释数据的作用.

通常的做法是，当自然数 r 使 $\sum_{i=1}^{r}\widehat{\lambda}_i/p$ 足够大(例如不小于80%)时，取 $q=r$,

$$\widehat{A}=[\sqrt{\widehat{\lambda}_1}\widehat{b}_1,\sqrt{\widehat{\lambda}_2}\widehat{b}_2,\cdots,\ \sqrt{\widehat{\lambda}_r}\widehat{b}_r],\widehat{\psi}_i=1-\widehat{h}_i^2,$$

其中 $\widehat{h}_i^2=\sum_{j=1}^{r}\widehat{a}_{ij}^2$, $\widehat{a}_{ij}$ 是 $\widehat{A}$ 的 (i,j) 元. 此时，$\widehat{R}$ 与 $\widehat{A}\widehat{A}^{\mathrm{T}}+\widehat{\Psi}$ 有相同的对角线元素，此处 $\widehat{\Psi}=\mathrm{diag}(\widehat{\psi}_1,\widehat{\psi}_2,\cdots,\widehat{\psi}_p)$；而 $\widehat{R}-(\widehat{A}\widehat{A}^{\mathrm{T}}+\widehat{\Psi})$ 的非对角线元素的平方和不超过 $\sum_{i=r+1}^{p}\widehat{\lambda}_i$.

给出了 q,$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 的估计以后,还要利用模型式(3-3)和式(3-4)的不确定性,对 $\boldsymbol{A}$ 作适当调整,以便对公共因子的实际意义作出解释. 假定 $\boldsymbol{y}$ 已经标准化,任取 q 阶正交矩阵 $\boldsymbol{T}$,由式(3-3),有

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{f} + \boldsymbol{e} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{f} + \boldsymbol{e} = \boldsymbol{\mu} + \widetilde{\boldsymbol{A}}\widetilde{\boldsymbol{f}} + \boldsymbol{e},$$

其中

$$\widetilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{T}, \quad \widetilde{\boldsymbol{f}} = \boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{f}.$$

对于分解式 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\mu} + \widetilde{\boldsymbol{A}}\widetilde{\boldsymbol{f}} + \boldsymbol{e}$,条件式(3-4)仍能满足,且 $\boldsymbol{y}$ 的相关矩阵

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\Psi} = \widetilde{\boldsymbol{A}}\widetilde{\boldsymbol{A}}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\Psi}.$$

因此 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{f}$ 有相当宽的选择余地,这就是所谓的不确定性.

当 $\boldsymbol{A}$ 的 (i,j) 元 $a_{ij} = 0$ 时,第 j 个公共因子对 y_i 不起作用. 在给出 $\boldsymbol{A}$ 的估计 $\widehat{\boldsymbol{A}}$ 后,选择 q 阶正交矩阵 $\boldsymbol{T}$ 使得 $\widehat{\widetilde{\boldsymbol{A}}} = \widehat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{T}$ 有尽可能多的元素接近于零,则可把 $\widehat{\widetilde{\boldsymbol{A}}}$ 作为 $\boldsymbol{A}$ 的估计.

$\widehat{\widetilde{\boldsymbol{A}}}$ 的这种简单结构有助于对公共因子的实际意义作出解释. 例如 $\widehat{\widetilde{\boldsymbol{A}}}$ 的第一列元素 $\widehat{\tilde{a}}_{11}, \widehat{\tilde{a}}_{21}, \cdots, \widehat{\tilde{a}}_{p1}$ 中 $\widehat{\tilde{a}}_{11}, \widehat{\tilde{a}}_{21}$ 的绝对值大,而其他元素的绝对值小,则第一个公共因子可作为 $\boldsymbol{y}$ 的头两个分量 y_1 和 y_2 的代表.

在因子分析中,除了正交因子模型外,还有斜交因子模型(参见文献[4]).

因子分析的理论还欠完善,需要统计学家做进一步的研究.

4　聚类分析

聚类分析也是简化数据的一种统计方法. 它研究如何把数据分成若干个类,使同一类的数据间差异小,而不同类的数据间差异大.

设对 n 个个体各观测了 p 个特性(变量),获得数据矩阵

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}. \tag{4-1}$$

用 $\boldsymbol{x}_{(i)}$ 和 $\boldsymbol{x}_{(j)}$ 分别表示这个矩阵的第 i 个行向量的转置和第 j 个列向量. 对 n 个样品 $\boldsymbol{x}_{(1)}, \boldsymbol{x}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{x}_{(n)}$ 进行分类或对 p 个变量进行分类,称为聚类,前者称为 **Q 型聚类**,后者称为 **R 型聚类**. 在进行 Q 型聚类前,通常要对变量进行选择或对变量作聚类,去掉无关紧要的变量,保留重要的变量.

聚类分析中有两个关键问题:一是衡量样品(或变量)间邻近或相似程度的度量,另一个是聚类方法.

4.1 距离和相似系数

距离和相似系数分别是度量样品间和变量间邻近或相似的常用量，它们的定义与变量的类型有关．这里仅考虑取实数值的变量．

4.1.1 样品间的距离

样品 $\boldsymbol{x}_{(i)}=(x_{i1},x_{i2},\cdots,x_{ip})^{\mathrm{T}}$ 与 $\boldsymbol{x}_{(j)}=(x_{j1},x_{j2}\cdots,x_{jp})^{\mathrm{T}}$ 的距离用 d_{ij} 表示．一般要求 d_{ij} 满足下述三个条件：

1° $d_{ij}\geqslant 0 \qquad (i,j=1,2,\cdots,n)$；

2° $d_{ij}=0\Leftrightarrow \boldsymbol{x}_{(i)}=\boldsymbol{x}_{(j)}$；

3° $d_{ij}=d_{ji} \qquad (i,j=1,2,\cdots,n)$.

d_{ij} 越小表明 $\boldsymbol{x}_{(i)}$ 和 $\boldsymbol{x}_{(j)}$ 越靠近．距离小的样品应该归为一类．

常用的距离有以下两种．

1. 闵可夫斯基距离

$$d_{ij}(q)=\Big[\sum_{k=1}^{p}|x_{ik}-x_{jk}|^{q}\Big]^{1/q} \quad (q\geqslant 1), \tag{4-2}$$

其中 $d_{ij}(1)$ 为绝对值距离，$d_{ij}(2)$ 为欧氏距离．当 p 个变量的度量单位相同时，闵可夫斯基(H. Minkowski) 距离是合适的．当度量单位不同时，通常用标准化欧氏距离

$$d_{ij}=\Big[\sum_{k=1}^{p}\hat{v}_{kk}^{-1}(x_{ik}-x_{jk})^{2}\Big]^{\frac{1}{2}}, \tag{4-3}$$

其中 $\hat{v}_{kk}^{-1}$ 是下述矩阵 $\hat{\boldsymbol{V}}$ 的 (k,k) 元，

$$\hat{\boldsymbol{V}}=(n-1)^{-1}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_{(i)}-\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_{(i)}-\bar{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}, \tag{4-4}$$

$$\bar{\boldsymbol{x}}=n^{-1}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_{(i)}.$$

距离式(4-3) 在改变变量的度量单位情况下保持不变．

2. 马哈拉诺比斯距离

马哈拉诺比斯(P. C. Mahalanobis) 距离又简称为马氏距离，其表达式为

$$d_{ij}^{2}=(\boldsymbol{x}_{(i)}-\boldsymbol{x}_{(j)})^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{V}}^{-1}(\boldsymbol{x}_{(i)}-\boldsymbol{x}_{(j)}). \tag{4-5}$$

采用马氏距离的前提是 $\boldsymbol{x}_{(1)},\boldsymbol{x}_{(2)},\cdots,\boldsymbol{x}_{(n)}$ 有相同的协方差矩阵．但这个条件不一定能满足．这是因为不同类的样品的协方差矩阵可能不相同．

4.1.2 变量间的相似系数

第 i 个变量与第 j 个变量间相似系数用 c_{ij} 表示．c_{ij} 越大表明第 i 个变量与第 j 个变量越密切．相似系数大的变量应归为一类．相似系数主要有如下两种．

1. 相关系数

相关系数

$$c_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{n}(x_{ki} - \bar{x}_{\cdot i})(x_{kj} - \bar{x}_{\cdot j})}{\left(\sum_{k=1}^{n}(x_{ki} - \bar{x}_{\cdot i})^2 \sum_{k=1}^{n}(x_{kj} - \bar{x}_{\cdot j})^2\right)^{\frac{1}{2}}}, \tag{4-6}$$

其中

$$\bar{x}_{\cdot i} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_{ki}.$$

相关系数是最常用的相似系数，它在变量的仿射变换（改变度量单位和原点）下保持不变．在一些实际问题中，用式(4-6)右边的绝对值作为相似系数更合理．为行文方便，这个绝对值仍然用 c_{ij} 表示．

2. 夹角余弦

夹角余弦

$$c_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{n} x_{ki}x_{kj}}{\left(\left(\sum_{k=1}^{n} x_{ki}^2\right)\sum_{k=1}^{n} x_{kj}^2\right)^{\frac{1}{2}}} = \frac{\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j}{(\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j)^{\frac{1}{2}}},$$

它在变量的度量单位改变下保持不变．

顺便指出，可用类似于变量情形定义样品间的相关系数和夹角余弦，但用它们作为样品间靠近程度的度量在统计上意义不太明确；也可类似于样品情形定义变量间的距离，但用它们作为变量间接近程度的度量在统计上意义也不太明确．

4.2　聚类方法

4.2.1　Q型聚类法

对于由某些样品组成的集合 G，符号"$i \in G$"表示样品 $\boldsymbol{x}_{(i)}$ 属于 G．d_{ij} 表示 $\boldsymbol{x}_{(i)}$ 和 $\boldsymbol{x}_{(j)}$ 的距离．Q型聚类分析的目的是要把所考察的 n 个样品分成若干个相互不同的类．为此要先给类下定义．由于实际问题的不同，类的含义也不同．下面是可供选择的类的几个定义．

(1) 对于阈值 T，如果对于任意的 $i,j \in G$，都有 $d_{ij} \leqslant T$，则称 G 为一个类．

(2) 对于阈值 T，如果对于每个 $i \in G$，都有

$$\frac{\sum_{j\in G} d_{ij}}{k-1} \leqslant T,$$

则称 G 为一个类．此处 k 为 G 中样品个数．

(3) 对于阈值 T 和 $M(T < M)$，如果对于一切 $i,j \in G$，有

$$d_{ij} \leqslant M, \quad 且 \quad \frac{\sum_{i\in G}\sum_{j\in G} d_{ij}}{k(k-1)} \leqslant T,$$

则称 G 为一个类．这里 k 为 G 中样品个数．

按照统计学的观点，一个类是一个总体，不同的类是不同的总体．在选择类的定义时，应注意其实际意义和统计意义．

在聚类分析中还要用到不同类间的距离．类 G_m 与类 G_q 间的距离用 $D(m,q)$ 表示．类与类的距离有下述可供选择的几种定义．

(1)　$D_1(m,q) = \min\limits_{i\in G_m, j\in G_q} d_{ij}$　（最短距离）．

(2)　$D_2(m,q) = \max\limits_{i\in G_m, j\in G_q} d_{ij}$　（最长距离）．

(3)　$D_3^2(m,q) = (n_m n_q)^{-1} \sum\limits_{i\in G_m, j\in G_q} d_{ij}^2$　（均方距离），

其中 n_m 和 n_q 分别是 G_m 和 G_q 中样品个数．

(4)　$D_4(m,q)$ = "样品"$\bar{\boldsymbol{x}}(m)$ 和"样品"$\bar{\boldsymbol{x}}(q)$ 的欧氏距离　（重心距离），其中 $\bar{\boldsymbol{x}}(m)$ 表示类 G_m 的重心，即类 G_m 中样品的均值．也就是说，当 $\boldsymbol{x}(m_1)$，$\boldsymbol{x}(m_2),\cdots,\boldsymbol{x}(m_t)$ 是 G_m 的全部样品时，

$$\bar{\boldsymbol{x}}(m) = t^{-1}\sum_{j=1}^{t}\boldsymbol{x}(m_j).$$

必须注意，采用这种距离时，样品间的距离都用欧氏距离．

(5)　$D_s(m,q) = \frac{st}{s+t}[\bar{\boldsymbol{x}}(m) - \bar{\boldsymbol{x}}(q)]^{\mathrm{T}}[\bar{\boldsymbol{x}}(m) - \bar{\boldsymbol{x}}(q)]$

（离差平方和距离），

其中 t 和 s 分别是类 G_m 和 G_q 中样品的个数 $\bar{\boldsymbol{x}}(m)$ 和 $\bar{\boldsymbol{x}}(q)$ 分别是 G_m 和 G_q 的重心．

显然，样品间距离的不同定义可导致类间距离 D_1 的不同、D_2 的不同和 D_3 的不同．

聚类方法有系统聚类法、分解聚类法、有序样品聚类法、动态聚类法、模糊聚类法等多种，这里仅介绍系统聚类法．

系统聚类法按照类间距离的不同定义又可分为最短距离法、最长距离法、平均距离法（相应于 D_3）、重心距离法和离差平方和法等．下面只介绍最短距离法．

首先，视 n 个样品各自成一类，此时各类之间的距离等于各样品间的距离．选择距离最近的两类并成一个新类．计算新类和其他类的距离（注意，用最短距离 D_1），再将距离最近的两类合并．如此反复做下去，每次减少一类，直至所有样品成为一类为止．

最长距离法与最短距离法的聚类步骤相同，唯一不同是类与类的距离，前者用最长距离 D_2，后者用最短距离 D_1．必须注意，并类原则都是把距离最近的两类合并．

其他类型的系统聚类法类似，这里不赘述．

在系统聚类的过程中，每一步都要计算新类与其他各类的距离．为了便于计算，人们寻找递推公式．威沙特于 1969 年给出了适用于类间距离不同定义的统一递推公式：

用 $D(u,v)$ 表示在某一步类 G_u 和 G_v 的距离．在 G_m 和 G_q 合并成新类 G_r 后，G_r

与另一类 G_k 的距离 $\overline{D}(k,r)$ 可表成

$$\overline{D}^2(k,r) = \alpha_m D^2(m,k) + \alpha_q D^2(q,k) + \beta D^2(m,q) + \gamma \mid D^2(m,k) - D^2(q,k) \mid, \tag{4-7}$$

其中系数 α_m,α_q,β 和 γ 随聚类方法的不同而取值不同．表 4-1 为系统聚类法系数表，列出了前述五种系统聚类方法的四个系数值．表中 n_m,n_q,n_k 和 n_r 分别是 G_m，G_q，G_k 和 G_r 中样品个数($n_r = n_m + n_q$)．

表 4-1

方 法	α_m	α_q	β	γ
最短距离法	1/2	1/2	0	-1/2
最长距离法	1/2	1/2	0	1/2
平均距离法	n_m/n_r	n_q/n_r	0	0
重心法	n_m/n_r	n_q/n_r	$-n_m n_q/n_r^2$	0
离差平方和法	$(n_k+n_m)/(n_r+n_k)$	$(n_k+n_q)/(n_r+n_k)$	$-n_k/(n_k+n_r)$	0

系统聚类法的聚类过程可以画成一张图，称之为聚类图．如图 4-1 所示，图上横坐标的刻度是并类的距离，平行于横坐标的每一线段代表一个类，在并类的距离处把代表被并类的两条平行线聚成一条．图4-1所示的是 $n = 6$ 的聚类图．聚类图可使人们对聚类过程一目了然，也便于确定分多少类和如何分类．

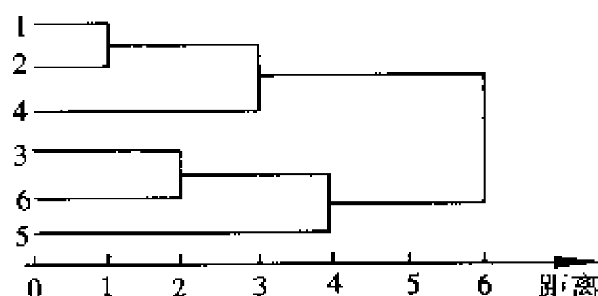


图 4-1

4.2.2 R 型聚类法

Q 型聚类法可照搬到 R 型聚类．但应注意下述几点：

(1) 用相似系数代替 Q 型聚类中的距离．

(2) 变量类 G_m 与 G_q 的相似系数 $C(m,q)$ 有不同的定义．例如，

① $$C_1(m,q) = \max_{i\in G_m, j\in G_q} c_{ij} \quad \text{(最大相似系数)}.$$

它相应于 Q 型中的最短距离．

② $$C_2(m,q) = \min_{i\in G_m, j\in G_q} c_{ij} \quad \text{(最小相似系数)}.$$

它相应于 Q 型中的最长距离．

③ $$C_3(m,q) = (p_m p_q)^{-1} \sum_{i\in G_m} \sum_{j\in G_q} c_{ij} \quad \text{(平均相似系数)},$$

其中 p_m 和 p_q 分别是类 G_m 和类 G_q 中变量的个数．它相应于 Q 型中的均方距离．

(3) 在系统聚类过程中的每一步，选择相似系数最大的两类合并．

在前面类间相似系数的三种定义下，计算类间的相似系数也有统一的递推公式．用 $C(u,v)$ 表示在某一步中变量类 G_u 与 G_v 的相似系数，则在把类 G_m 与 G_q 合并成新类 G_γ 后，G_γ 与另一类 G_k 的相似系数 $\widetilde{C}(\gamma,k)$ 可表示成

$$\begin{aligned}\widetilde{C}(\gamma,k) = \alpha_m C(m,k) + \alpha_q C(q,k) + \beta C(m,q) + \\ \gamma \mid C(m,k) - C(q,k) \mid,\end{aligned} \tag{4-8}$$

其中 α_m,α_q,β 和 γ 的最大相似系数法、最小相似系数法和类平均法的取值分别与表 4-1 中的最长距离法、最短距离法和平均距离法的取值相同．

需要特别指出，对于同一聚类问题，不同的聚类方法可能得出不同的分类．这要根据问题的实际背景及有关知识选择符合实际的方法．

5 判别分析

设有 $k(k \geqslant 2)$ 个不同的 p 维总体 $G_1,G_2,\cdots,G_k$，它们的分布函数分别是 $F_1(\boldsymbol{y}),F_2(\boldsymbol{y}),\cdots,F_k(\boldsymbol{y})$．现有一个属于这 k 个总体之一的样本 $\boldsymbol{y}$(p 维)，那么，如何判断它究竟属于哪一个总体呢？这就是**判别分析**研究的问题．

判别分析在社会科学、自然科学、工农业生产和日常生活中都有广泛的应用．例如医生根据病人的症状和检查结果判断病人患何种疾病等．

分布函数 $F_1(\boldsymbol{y}),F_2(\boldsymbol{y}),\cdots,F_k(\boldsymbol{y})$ 可能完全已知(罕见情况)，也可能部分未知或完全未知．对于后两种情况，总体的信息通常不足以对样品 $\boldsymbol{y}$ 的归属作出判断，需要借助已有的来自各个总体的样本的信息．此时设已有 k 个分别来自 G_1，$G_2,\cdots,G_k$ 的独立同分布样本：

$$\begin{cases}\boldsymbol{y}_1^{(1)},\cdots,\boldsymbol{y}_{n_1}^{(1)} \text{ 来自 } G_1, \\ \quad\vdots \\ \boldsymbol{y}_1^{(k)},\cdots,\boldsymbol{y}_{n_k}^{(k)} \text{ 来自 } G_k.\end{cases} \tag{5-1}$$

称式(5-1)中诸样本为训练样本．记 $n = \sum_{j=1}^{k} n_i$，

$$\begin{cases}\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)} = \dfrac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i}\boldsymbol{y}_j^{(i)}, \\ \boldsymbol{S}_i = \sum_{j=1}^{n_i}(\boldsymbol{y}_j^{(i)} - \overline{\boldsymbol{y}}^{(i)})(\boldsymbol{y}_j^{(i)} - \overline{\boldsymbol{y}}^{(i)})^{\mathrm{T}} \qquad (i = 1,2,\cdots,k).\end{cases} \tag{5-2}$$

本章介绍判别分析中的三种常用方法：距离判别、贝叶斯(F. Bayes)判别和费希尔判别．这三种方法都是按照各自的准则把 p 维欧氏空间 $\mathbf{R}^p$ 分成 k 个互不相交的区域(集合) $D_1,D_2,\cdots,D_k$，并称 $\{D_1,D_2,\cdots,D_k\}$ 为 $\mathbf{R}^p$ 的一个划分；当样品 $\boldsymbol{y} \in D_i$ 时，判定 $\boldsymbol{y}$ 来自总体 G_i．

5.1 距离判别

假定第 i 个总体的均值和协方差阵分别为 $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{V}^{(i)}$, $i=1,2,\cdots,k$, 且它们都是已知的,那么样品 $\boldsymbol{y}$ 与总体 G_i 的马哈拉诺比斯距离(简称马氏距离)为

$$d^2(\boldsymbol{y},G_i)=(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\mu}^{(i)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\mu}^{(i)})\qquad(i=1,2,\cdots,k).$$

$d^2(\boldsymbol{y},G_i)$ 越小, $\boldsymbol{y}$ 与总体 G_i 越靠近 . 若

$$d^2(\boldsymbol{y},G_i)<d^2(\boldsymbol{y},G_j)\qquad(j\neq i;j=1,2,\cdots,k),\tag{5-3}$$

则判 $\boldsymbol{y}$ 来自 G_i. 若

$$d^2(\boldsymbol{y},G_{i_1})=\cdots=d^2(\boldsymbol{y},G_{i_m})<d^2(\boldsymbol{y},G_j)$$
$$(j\neq i_q;q=1,2,\cdots,m;j=1,2,\cdots,k),\tag{5-4}$$

则判 $\boldsymbol{y}$ 来自 $G_{i_1},G_{i_2},\cdots,G_{i_m}$ 中任一个均可 . 记

$$D'_i=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^p,d^2(\boldsymbol{x},G_i)<d^2(\boldsymbol{x},G_j),j\neq i,j=1,2,\cdots,k\}\quad(i=1,2,\cdots,k).\tag{5-5}$$

把集合 $D'_1,D'_2,\cdots,D'_k$ 间的边界划归相邻集合中的一个,其结果记为 $D_1,D_2,\cdots,D_k$, 则 $\{D_1,D_2,\cdots,D_k\}$ 是 $\mathbf{R}^p$ 的一个划分 . 判别规则式(5-3) 和式(5-4) 化为 $\boldsymbol{y}\in D_i$ 时判 $\boldsymbol{y}$ 来自 G_i.

当 $\boldsymbol{V}^{(1)}=\boldsymbol{V}^{(2)}=\cdots=\boldsymbol{V}^{(k)}=\boldsymbol{V}$ 时

$$d^2(\boldsymbol{y},G_j)-d^2(\boldsymbol{y},G_i)=2\left(\boldsymbol{y}-\frac{\boldsymbol{\mu}^{(i)}+\boldsymbol{\mu}^{(j)}}{2}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}(\boldsymbol{\mu}^{(i)}-\boldsymbol{\mu}^{(j)}),\tag{5-6}$$

称

$$W_{ij}(\boldsymbol{y})=\left(\boldsymbol{y}-\frac{\boldsymbol{\mu}^{(i)}+\boldsymbol{\mu}^{(j)}}{2}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}(\boldsymbol{\mu}^{(i)}-\boldsymbol{\mu}^{(j)})$$

为判决函数,它是 $\boldsymbol{y}$ 的线性函数 . 此时,式(5-3) 化为

$$W_{ij}(\boldsymbol{y})>0\qquad(j\neq i;j=1,2,\cdots,k);\tag{5-7}$$

式(5-5) 化为

$$D'_i=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^p,W_{ij}(\boldsymbol{x})>0,j\neq i,j=1,2,\cdots,k\}.\tag{5-8}$$

在通常情况下, $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{V}^{(i)}$ 都是未知的 . 这时假定有训练样本式(5-1), 并分别用

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}^{(i)}=\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)},\tag{5-9}$$

$$\widehat{\boldsymbol{V}}^{(i)}=(n_i-1)^{-1}\boldsymbol{S}_i,\tag{5-10}$$

来估计 $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{V}^{(i)}$, $i=1,2,\cdots,k$, 此处的 $\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{S}_i$ 见式(5-2). 还可假定 $\widehat{\boldsymbol{V}}^{(i)}$, $i=1,2,\cdots,k$ 都是非奇异的 . 把 $\widehat{\boldsymbol{\mu}}^{(i)}$ 和 $\widehat{\boldsymbol{V}}^{(i)}$ 分别代替式(5-5) 中的 $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{V}^{(i)}$, 并约定 $D'_1,D'_2,\cdots,D'_k$ 间边界点的归属,便得到 $\mathbf{R}^p$ 的一个划分 $\{D_1,D_2,\cdots,D_k\}$. 当待判样品 $\boldsymbol{y}\in D_j$ 时,判 $\boldsymbol{y}$ 来自 G_j. 当 $\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{V}_2=\cdots=\boldsymbol{V}_k\overset{\text{def}}{=\!=}\boldsymbol{V}$ 时, $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 的估计 $\widehat{\boldsymbol{\mu}}^{(i)}$ 仍由式(5-9) 给出 . $\boldsymbol{V}$ 的一个常用估计是

$$\hat{V} = (n-k)^{-1}\sum_{j=1}^{k} S_j.$$

用 $\hat{\mu}^{(i)}$ 和 $\hat{V}$ 分别代替式(5-8)中 $\mu^{(i)}$ 和 V 后，约定 $D'_1, D'_2, \cdots, D'_k$ 间边界点的归属，便得到 $\mathbf{R}^p$ 的一个划分 $\{D_1, D_2, \cdots, D_k\}$. 当待判样品 $y \in D_j$ 时，判 y 来自 G_j.

这样的判别方法称为**距离判别**. 距离判别的一个优点是直观，且只用到总体或样本的前二阶矩.

5.2 贝叶斯判别

贝叶斯判别是贝叶斯决策在判别分析中的应用.

在判别分析中，统计决策三要素的具体表现如下：

(1) 样本空间和分布族. 前者是样品 y 的值域 $\mathbf{R}^p$; 分布族为 $\{F_1(y), F_2(y), \cdots, F_k(y)\}$，其中 F_i 为第 i 个总体 G_i 的分布. 设 $F_i(y)$ 的分布密度函数为 $f_i(y)$.

(2) 行动空间 $\mathscr{A} = \{a_1, a_2, \cdots, a_k\}$. 采取行动 a_i 表示判定 y 来自 G_i.

(3) 损失函数 $l(i, a_j) = c(j \mid i), c(i \mid i) = 0. i \neq j$ 时 $0 < c(j \mid i) < \infty, i, j = 1, 2, \cdots, k.$ $l(i, a_j)$ 表示当 y 实际上来自 G_i 而判定 y 来自 G_j 时所造成的损失.

判决函数 $\delta(y)$ 与 $\mathbf{R}^p$ 的一个划分 $\{D_1, D_2, \cdots, D_k\}$ 相对应，当且仅当 $y \in D_i$ 时 $\delta(y) = a_i$，即采取行动 a_i. 这个判决函数在 y 实际上来自 G_i 时的损失为

$$L(i, D_1, D_2, \cdots, D_k) = \sum_{j=1}^{k} c(j \mid i) I_{D_j}(y) = \sum_{j \neq i} c(j \mid i) I_{D_j}(y),$$

其中

$$I_D(y) = \begin{cases} 1 & (y \in D), \\ 0 & (\text{其他}). \end{cases}$$

判决函数 $\{D_1, D_2, \cdots, D_k\}$ 的风险函数为

$$R(i; D_1, D_2, \cdots, D_k) = E(L(i; D_1, D_2, \cdots, D_k) \mid G_i) = \sum_{j=1}^{k} c(j \mid i) \int_{D_j} f_i(y) \mathrm{d}y,$$

其中 $E(\cdot \mid G_i)$ 表示在总体 G_i 的分布 F_i 下求期望.

假定依据专业知识或经验在得到样品 y 之前就知道待判样品来自 G_i 的概率为 $q_i, i = 1, 2, \cdots, k, \sum_{i=1}^{k} q_i = 1$，则称 $q_1, q_2, \cdots, q_k$ 为先验概率，离散分布 $q \overset{\text{def}}{=\!=} \{q_1, q_2, \cdots, q_k\}$ 称为先验分布. 如果在过去的 m 个样品中，有 m_i 个来自 G_i，则可取 $q_i = m_i/m, i = 1, 2, \cdots, k.$ $\{D_1, D_2, \cdots, D_k\}$ 相应于先验分布 q 的贝叶斯风险为

$$R_q(D_1, D_2, \cdots, D_k) = \sum_{i=1}^{k} q_i R(i; D_1, D_2, \cdots, D_k) = \sum_{i=1}^{k} q_i \sum_{j=1}^{k} c(j \mid i) \int_{D_j} f_i(y) \mathrm{d}y.$$

设 $\{D_1, D_2, \cdots, D_k\}$ 是 $\mathbf{R}^p$ 的一个划分. 若对于 $\mathbf{R}^p$ 的任一个划分 $\{D_1^*, D_2^*, \cdots, D_k^*\}$，都有

$$R_q(D_1, D_2, \cdots, D_k) \leqslant R_q(D_1^*, D_2^*, \cdots, D_k^*),$$

则称 $\{D_1, D_2, \cdots, D_k\}$ 是关于先验分布 q 的**贝叶斯判别解**．关于贝叶斯判别解，有下述结果．记

$$h_j(y) = \sum_{i=1}^{k} q_i c(j \mid i) f_i(y),$$

$$D'_j = \{x : h_j(x) < h_i(x), i \neq j, i = 1,2,\cdots,k\}.$$

当 $h_{j_1}(x_0) = h_{j_2}(x_0) = \cdots = h_{j_r}(x_0) < h_i(x_0), i \neq j_1, j_2, \cdots, j_r, i = 1,2,\cdots,k$ 时，把 x_0 归并到 $D'_{j_1}, D'_{j_2}, \cdots, D'_{j_r}$ 中的某一个，其结果 $\{D_1, D_2, \cdots, D_k\}$ 便是关于 q 的贝叶斯判别解．

当 $c(j \mid i) = a\delta_{ij}, i, j = 1,2,\cdots,k$ 时，D'_j 简化为

$$D'_j = \{x : q_j f_j(x) > q_i f_i(x), i \neq j, i = 1,2,\cdots,k\}. \tag{5-11}$$

这个 D'_j 的直观意义很明确．$q_j f_j(y)$ 综合了总体 G_j 的先验信息 q_j 和 G_j 的样品信息 $f_j(y)$，因此，当 $q_j f_j(y)$ 大时，应该判 y 来自 G_j．称 $q_j f_j(y)$ 为第 j 个判别函数，$j = 1, 2, \cdots, k$．

例1　设 G_i 的分布为 $N_p(\boldsymbol{\mu}^{(i)}, \boldsymbol{V}^{(i)}), i = 1,2,\cdots,k$；$c(j \mid i) = a\delta_{ij}, i, j = 1, 2, \cdots, k$；先验分布为 $q = \{q_1, q_2, \cdots, q_k\}, q_i > 0, i = 1,2,\cdots,k$．式(5-11) 化为

$$D'_j = \{y : g_j(y) > g_i(y), i \neq j, i = 1,2,\cdots,k\}, \tag{5-12}$$

其中

$$g_j(y) = \ln q_j - \frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{V}^{(j)}| - \frac{1}{2}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{V}^{(j)})^{(-1)}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{\mu}^{(j)\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_{(j)}{}^{-1}\boldsymbol{y} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}^{(j)\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{(j)-1}\boldsymbol{\mu}^{(j)}.$$

注意到在正态假定下，$D'_1, D'_2, \cdots, D'_k$ 间的边界的概率为零，因此，可把 $\{D'_1, D'_2, \cdots, D'_k\}$ 视为 $\mathbf{R}^p$ 的一个划分．称 $g_j(y)$ 为第 j 个判别函数，它是 y 的二次函数，$j = 1,2,\cdots,k$．

当 $\boldsymbol{V}^{(1)} = \boldsymbol{V}^{(2)} = \cdots = \boldsymbol{V}^{(k)} \xlongequal{\text{def}} \boldsymbol{V}$ 时，判别函数简化为

$$b_j(y) = \ln q_j - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}^{(j)\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{\mu}^{(j)} + \boldsymbol{\mu}^{(j)\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{y},$$

它是 y 的线性函数．于是 D'_j 化为

$$D'_j = \{y : b_j(y) > b_i(y), i \neq j, i = 1,2,\cdots,k\}. \tag{5-13}$$

又若 $q_i = 1/k, i = 1,2,\cdots,k$，则 D'_j 化为

$$D'_j = \{y : [\boldsymbol{y} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}^{(i)} + \boldsymbol{\mu}^{(j)})]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}(\boldsymbol{\mu}^{(j)} - \boldsymbol{\mu}^{(i)}) > 0, i \neq j, i = 1,2,\cdots,k\}. \tag{5-14}$$

这与距离判别一致．

当总体的分布密度 $f_1(y), f_2(y), \cdots, f_k(y)$ 未知或部分未知时，必须用训练样本式(5-1) 来对未知量作出估计．下面以例1为例来说明．

$\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{V}^{(i)}$ 的估计分别为

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}^{(i)} = \overline{\boldsymbol{y}}^{(i)}, \tag{5-15}$$

$$\hat{V}^{(i)} = (n_i - 1)^{-1} S_i \qquad (i = 1,2,\cdots,k).$$

此处的 $y^{(i)}$ 和 S_i 见式(5-2). 为保证 $V^{(i)}$ 有逆,施加条件 $n_i \geqslant p+1, i = 1,2,\cdots,k$. 把 $\hat{\mu}^{(i)}$ 和 $\hat{V}^{(i)}$ 分别代替式(5-12)中的 $\mu^{(i)}$ 和 $V^{(i)}$ 得到 $D'_1, D'_2, \cdots, D'_k$. 当样品 $y \in D'_i$ 时,判 y 来自 G_i. 当 $V^{(1)} = V^{(2)} = \cdots = V^{(k)} \stackrel{\text{def}}{=\!=} V$ 时,用

$$\hat{V} = (n-k)^{-1} \sum_{i=1}^{k} S_i$$

作为 V 的估计. 把 $\hat{\mu}^{(i)}$(见式(5-15))和 $\hat{V}$分别代替式(5-13)中的 $\mu^{(i)}$ 和 V 得到 $\mathbf{R}^p$ 的划分 $\{D'_1, D'_2, \cdots, D'_k\}$. 当样品 $y \in D_i$ 时,判 y 来自 G_i.

5.3 费希尔判别

费希尔判别的准则和方法是统计学的主要奠基人费希尔于1936年提出的. 先介绍费希尔判别分析中要用到的一个代数引理.

引理 1 设 A 和 B 都是 m 阶实对称矩阵,且 B 正定. 对 $B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}}$ 作谱分解,

$$B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}} = P\mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m)P^{\mathrm{T}},$$

其中 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_m$ 是$B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}}$ 的特征根,m 阶正交矩阵 P 的第 i 列 p_i 是相应于 λ_i 的特征向量,则有

1° $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m$ 也是$B^{-1}A$ 的特征根;$q_i \stackrel{\text{def}}{=\!=} B^{-\frac{1}{2}}p_i$ 是 $B^{-1}A$ 的相应于λ_i 的特征向量,$i = 1,2,\cdots,m$,且 $q_i^{\mathrm{T}}Bq_j = \delta_{ij}, i,j = 1,2,\cdots,m$.

2° $\max\limits_{\alpha^{\mathrm{T}}B\alpha=1} \dfrac{\alpha^{\mathrm{T}}A\alpha}{\alpha^{\mathrm{T}}B\alpha} = \lambda_1$,且极值在 $\alpha = q_1$ 处达到; $\max\limits_{\substack{\alpha^{\mathrm{T}}B\alpha=1\\ \alpha^{\mathrm{T}}Bq_1=0}} \dfrac{\alpha^{\mathrm{T}}A\alpha}{\alpha^{\mathrm{T}}B\alpha} = \lambda_2$,且极值在 $\alpha = q_2$ 处达到.

一般地,对于 $k = 2,3,\cdots,m$,

$$\max_{\substack{\alpha^{\mathrm{T}}B\alpha=1\\ \alpha^{\mathrm{T}}Bq_i=0\\ i=1,2,\cdots,k-1}} \frac{\alpha^{\mathrm{T}}A\alpha}{\alpha^{\mathrm{T}}B\alpha} = \lambda_k,$$

且极值在 $\alpha = q_k$ 处达到.

5.3.1 两总体的费希尔判别

设有两个 p 维总体 G_1 和 G_2,它们的均值分别为 $\mu^{(1)}$ 和 $\mu^{(2)}$,协方差矩阵分别为 $V^{(1)}$ 和 $V^{(2)}$. 又设随机向量 y 来自 G_1 或 G_2.

费希尔判别的基本思想是,找一个方向 a(p 维向量),使得在这个方向上总体 G_1 与 G_2 的差别最大,也就是在 G_1 下 $a^{\mathrm{T}}y$ 的总体 G_{1a} 与在 G_2 下 $a^{\mathrm{T}}y$ 的总体 G_{2a} 的差别最大;当 a 确定之后,对于待判定的样品 y_0,如果 $a^{\mathrm{T}}y_0$ 与 G_{1a} 的距离小于$a^{\mathrm{T}}y_0$ 与 G_{2a} 的距离,则判 y_0 来自 G_1,否则判 y_0 来自 G_2.

G_{1a} 与 G_{2a} 的差异 Δ^2 用"$\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 在 G_1 和 G_2 下均值之差的平方与 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 在 G_1 和 G_2 下方差的和之比"来刻画,即

$$\Delta^2 = \frac{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))^2}{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{V}^{(1)} + \boldsymbol{V}^{(2)})\boldsymbol{a}}.$$

由施瓦茨(Schwarz)不等式,Δ^2 的最大值在

$$\boldsymbol{a} = c(\boldsymbol{V}^{(1)} + \boldsymbol{V}^{(2)})^{-1}(\boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})$$

处达到,此处 c 是任意非零常数. 因 Δ^2 与 $\boldsymbol{a}$ 的长度无关,故不妨取 $c = 1$. 于是 $\boldsymbol{a}_0 \stackrel{\mathrm{def}}{=} (\boldsymbol{V}^{(1)} + \boldsymbol{V}^{(2)})^{-1}(\boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})$ 就是所求的方向. 称 $\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 为费希尔判别函数. 记

$$e_i = E(\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \mid G_i) = (\boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{V}^{(1)} + \boldsymbol{V}^{(2)})^{-1}\boldsymbol{\mu}^{(i)},$$
$$v_i = \mathrm{var}(\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \mid G_i) = \boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{(i)}\boldsymbol{a}_0 \qquad (i = 1,2).$$

$\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_0$ 与 G_{ia_0} 的马氏距离为

$$d^2(\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_0, G_i) = v_i^{-1}(\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_0 - e_i)^2 = v_i^{-1}((\boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{V}^{(1)} + \boldsymbol{V}^{(2)})^{-1}(\boldsymbol{y}_0 - \boldsymbol{\mu}^{(i)}))^2. \tag{5-16}$$

当 $d^2(\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_0, G_1) < d^2(\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_0, G_2)$ 时,判 $\boldsymbol{y}_0$ 来自 G_1,否则判 $\boldsymbol{y}_0$ 来自 G_2.

当 $\boldsymbol{V}^{(1)} = \boldsymbol{V}^{(2)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \boldsymbol{V}$ 时,有 $v_1 = v_2$,且

$$d^2(\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_0, G_1) < d^2(\boldsymbol{a}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_0, G_2)$$

等价于
$$(\boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}(\boldsymbol{y}_0 - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}^{(1)} + \boldsymbol{\mu}^{(2)})) > 0. \tag{5-17}$$

由此可知,当 $\boldsymbol{V}^{(1)} = \boldsymbol{V}^{(2)}$ 时,费希尔判别与距离判别一致.

当 $\boldsymbol{\mu}^{(i)}, \boldsymbol{V}^{(i)}$ 未知时,用训练样本式(5-1)($k = 2$情形)分别给出 $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{V}^{(i)}$ 的估计 $\widehat{\boldsymbol{\mu}}^{(i)} = \overline{\boldsymbol{y}}^{(i)}, \boldsymbol{V}^{(i)} = (n_i - 1)^{-1}\boldsymbol{S}_i, i = 1,2$. 把它们代进式(5-16),并根据前述的判别规则确定样品 $\boldsymbol{y}_0$ 的归属. 当 $\boldsymbol{V}^{(1)} = \boldsymbol{V}^{(2)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \boldsymbol{V}$ 时,用 $\widehat{\boldsymbol{V}} = (n - 2)^{-1}(\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)$ 作为 $\boldsymbol{V}$ 的估计. 把 $\widehat{\boldsymbol{\mu}}^{(i)}$ 和 $\widehat{\boldsymbol{V}}$ 代入式(5-17),并据此判断 $\boldsymbol{y}_0$ 的归属.

5.3.2 多总体的费希尔判别

假定 $k(k \geq 3)$ 个 p 维总体 $G_1, G_2, \cdots, G_k$ 的均值分别为 $\boldsymbol{\mu}^{(1)}, \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{\mu}^{(k)}$,它们有相同的协方差矩阵 $\boldsymbol{V}$. p 维随机向量 $\boldsymbol{y}$ 来自这 k 个总体之一. $\boldsymbol{\mu}^{(1)}, \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{\mu}^{(k)}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 通常是未知的,用训练样本式(5-1)给出它们的估计如下:

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}^{(i)} = \overline{\boldsymbol{y}}^{(i)} \qquad (i = 1,2,\cdots,k),$$
$$\widehat{\boldsymbol{V}} = (n - k)^{-1}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{S}_i,$$

其中 $\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)}$ 和 $\boldsymbol{S}_i$ 见式(5-2). 以下假定 $\widehat{\boldsymbol{V}}$ 有逆. 记

$$\overline{\boldsymbol{y}} = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i}\boldsymbol{y}_j^{(i)}.$$

矩阵

$$A \stackrel{\text{def}}{=\!=} \sum_{i=1}^{k}(\widehat{\boldsymbol{\mu}}^{(i)} - \overline{\boldsymbol{y}})(\widehat{\boldsymbol{\mu}}^{(i)} - \overline{\boldsymbol{y}})^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{k}(\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)} - \overline{\boldsymbol{y}})(\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)} - \overline{\boldsymbol{y}})^{\mathrm{T}}$$

是 k 个总体均值之间差异的一个度量．

k 个总体费希尔判别的思路是，先找 r 个方向 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_r$（都是 p 维向量，$r \leqslant \min\{p, k-1\}$，$r$ 待定），使得在每一个方向上，总体 $G_1, G_2, \cdots, G_k$ 间的差别尽可能大，且 $\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \boldsymbol{a}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \cdots, \boldsymbol{a}_r^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 两两不相关（即样本协方差 $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}\boldsymbol{a}_j = 0, i \neq j$ 时）；然后用这 r 个判别函数 $\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \cdots, \boldsymbol{a}_r^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 来构造判别规则．由于

$$\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{a}_i = \sum_{j=1}^{k}(\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}^{(j)} - \boldsymbol{y}))^2$$

是 $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 在 k 个不同总体下均值差异的一个度量，$\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}\boldsymbol{a}_i$ 是 $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 的样本方差，所以

$$\Delta_i^2 = \frac{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{a}_i}{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}\boldsymbol{a}_i}$$

是在 $\boldsymbol{a}_i$ 方向上 k 个总体间差异的一个度量．这样问题便归结为选择 $\boldsymbol{a}_i$，使得 Δ_i^2 尽可能大．因 Δ_i^2 与 $\boldsymbol{a}_i$ 的长度无关，故不妨取 $\boldsymbol{a}_i$ 使 $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}\boldsymbol{a}_i = 1$．下面利用引理 1 来找 $\boldsymbol{a}_i$．

设 $\widehat{\lambda}_1 \geqslant \widehat{\lambda}_2 \geqslant \cdots \geqslant \widehat{\lambda}_m > 0$ 是 $\widehat{\boldsymbol{V}}^{-1}A$ 的所有非零特征根，$\widehat{\boldsymbol{q}}_i$ 是相应于 $\widehat{\lambda}_i$ 的特征向量，满足

$$\widehat{\boldsymbol{q}}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}\widehat{\boldsymbol{q}}_j = \delta_{ij} \qquad (i, j = 1, 2, \cdots, m).$$

依引理 1，$\widehat{\boldsymbol{a}}_i = \widehat{\boldsymbol{q}}_i$ 是要找的第 i 个方向，$i = 1, 2, \cdots, m$，且有

$$\widehat{\boldsymbol{a}}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}\widehat{\boldsymbol{a}}_j = \delta_{ij}, \quad \frac{\widehat{\boldsymbol{a}}_i^{\mathrm{T}}A\widehat{\boldsymbol{a}}_i}{\widehat{\boldsymbol{a}}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}\widehat{\boldsymbol{a}}_i} = \widehat{\lambda}_i \qquad (i, j = 1, 2, \cdots, m).$$

称 $\widehat{\boldsymbol{a}}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 为第 i 个判别式，$i = 1, 2, \cdots, m$．通常，选择前几个判别式就够了．

个数 r 的选择如下：从第 i 个总体样本的重心 $\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)}$ 到 k 个总体所有样本的重心 $\boldsymbol{y}$ 的马氏距离为 $(\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)} - \overline{\boldsymbol{y}})^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}^{-1}(\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)} - \overline{\boldsymbol{y}})$，所以

$$\Delta^2 = \sum_{i=1}^{k}(\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)} - \overline{\boldsymbol{y}})^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}^{-1}(\overline{\boldsymbol{y}}^{(i)} - \boldsymbol{y})$$

是 k 个总体分离程度的一个度量．注意到

$$\Delta^2 = \mathrm{tr}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{m}\widehat{\lambda}_i,$$

而如前所述，

$$\widehat{\lambda}_i = \frac{\widehat{\boldsymbol{a}}_i^{\mathrm{T}}A\widehat{\boldsymbol{a}}_i}{\widehat{\boldsymbol{a}}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{V}}^{-1}\widehat{\boldsymbol{a}}_i}$$

是在第 i 个判别函数 $\widehat{\boldsymbol{a}}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 下 k 个总体分离程度的一个度量，$\widehat{\lambda}_i$ 大表明 $\widehat{\boldsymbol{a}}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 的贡献大．

当小于 m 的自然数 μ 满足 $\sum_{i=1}^{\mu}\widehat{\lambda}_i\Big/\sum_{i=1}^{m}\widehat{\lambda}_i$ 接近1时，选择 $r=\mu$ 即可．

选择了 r 之后，判别规则如下：对于待判样品 y_0，若

$$\sum_{j=1}^{r}(\widehat{a}_j^{\mathrm{T}}(y_0-\overline{y}^{(i)}))^2<\sum_{j=1}^{r}(\widehat{a}_j^{\mathrm{T}}(y_0-\overline{y}^{(s)}))^2\qquad(s\neq i,s=1,2,\cdots,k),$$

即基于前 r 个判别函数，y_0 与 G_i 的样本重心最近，则判 y_0 来自 G_i．若

$$\sum_{j=1}^{r}(\widehat{a}_j^{\mathrm{T}}(y_0-\overline{y}^{(i_1)}))^2=\cdots=\sum_{j=1}^{r}(\widehat{a}_j^{\mathrm{T}}(y_0-\overline{y}^{(i_\alpha)}))^2<\sum_{j=1}^{r}(\widehat{a}_j^{\mathrm{T}}(y_0-\overline{y}^{(s)}))^2$$

$$(s\neq i_p,p=1,2,\cdots,\alpha,s=1,2,\cdots,k),$$

则判 y_0 来自 $G_{i_1},G_{i_2},\cdots,G_{i_\alpha}$ 中任一个均可．

6 $I\times J$ 列联表

列联表是两元或多元频数表，被广泛用于各种调查数据的汇总．考虑两个离散型随机变量 A 和 B，A 取值 $1,2,\cdots,I$，B 取值 $1,2,\cdots,J$．令 p_{ij} 表示 $A=i$ 且 $B=j$ 的概率，即

$$p_{ij}=P(A=i,B=j).$$

假定对于所有 (i,j) 都有 $0\leqslant p_{ij}\leqslant 1$．表6-1给出了两个二值随机变量 A 和 B 的联合概率分布，A 和 B 取值为1或2．令 n_{ij} 表示样本中 $A=i$ 且 $B=j$ 的个体的频数．四个非负整数 $(n_{11},n_{12},n_{21},n_{22})$ 构成的频数表称为 2×2 列联表，n_{ij} 为 (i,j) 格内的观测频数，如表6-2所示．本章主要讨论两个离散型随机变量的概率分布、相关联系的测度和假设检验．

表6-1

	$B=1$	$B=2$
$A=1$	p_{11}	p_{12}
$A=2$	p_{21}	p_{22}

表6-2

	$B=1$	$B=2$
$A=1$	n_{11}	n_{12}
$A=2$	n_{21}	n_{22}

6.1 离散型数据的概率分布与抽样模型

当抽样调查是在规定时间内进行，不限制样本量的情况下，常常假定频数 $(n_{11},n_{12},\cdots,n_{IJ})$ 服从独立的泊松分布

$$f(n_{11},n_{12},\cdots,n_{IJ})=\prod_{i=1}^{I}\prod_{j=1}^{J}\frac{m_{ij}^{n_{ij}}\mathrm{e}^{-m_{ij}}}{n_{ij}!},$$

其中参数 $m_{ij}>0$，m_{ij} 为列联表中 (i,j) 格内的期望频数．

如果事先限定了样本量 N，即 $n_{11}+n_{12}+\cdots+n_{IJ}=N$ 为一给定的正整常数，

那么,由泊松分布在给定 N 的条件下得到频数($n_{11}, n_{12}, \cdots, n_{IJ}$)服从多项分布

$$f(n_{11}, n_{12}, \cdots, n_{IJ}) = \frac{N!}{\prod_{i=1}^{I}\prod_{j=1}^{J} n_{ij}!} \prod_{i=1}^{I}\prod_{j=1}^{J} p_{ij}^{n_{ij}},$$

其中

$$p_{ij} = \frac{m_{ij}}{N}.$$

在抽样方案设计或试验设计时,限定了行边缘总和($N_1+, N_2+, \cdots, N_I+$),即 $n_{i1} + n_{i2} + \cdots + n_{iJ} = N_{i+}$($i = 1,2,\cdots,I$)为给定的正整常数,所以,进一步可得频数($n_{11}, n_{12}, \cdots, n_{IJ}$)服从乘积多项分布

$$f(n_{11}, n_{12}, \cdots, n_{IJ}) = \prod_{i=1}^{I}\left(\frac{N_{i+}!}{\prod_{j=1}^{J} n_{ij}!} \prod_{j=1}^{J} p_{j|i}^{n_{ij}}\right),$$

其中 $p_{j|i} = P(B = j \mid A = i)$ 为给定 $A = i$ 下 $B = j$ 的条件概率,假定 $p_{i+} = P(A = i) > 0$. 类似地,可以给出列边缘总和($N_{+1}, N_{+2}, \cdots, N_{+J}$)给定时频数的联合分布.

当 A 和 B 都是二值变量(即 $I = J = 2$)时,如果行边缘总和以及列边缘总和($N_{1+}, N_{2+}, N_{+1}, N_{+2}$)都固定,则四个频数($n_{11}, n_{12}, n_{21}, n_{22}$)中仅一个可以自由变动,令其为 n_{11}. 当 $N_{+1} \leqslant N_{1+}$ 时,n_{11} 服从下面的非心参数为 ψ 的非心超几何分布

$$f(n_{11}) = \frac{\binom{N_{+1}}{n_{11}}\binom{N_{+2}}{N_{1+} - n_{11}}\psi^{n_{11}}}{\sum_{k=0}^{N_{+1}}\binom{N_{+1}}{k}\binom{N_{+2}}{N_{1+} - k}\psi^{k}},$$

其中参数 $\psi = p_{11}p_{22}/(p_{12}p_{21})$. 当 $N_{+1} > N_{1+}$ 时,可互换上式的行下标和列下标. 特别地,当 $\psi = 1$ 时,即随时变量 A 与 B 相互独立,得到超几何分布

$$f(n_{11}) = \frac{\binom{N_{+1}}{n_{11}}\binom{N_{+2}}{N_{1+} - n_{11}}}{\binom{N}{N_{1+}}},$$

其中

$$N = N_{1+} + N_{2+}.$$

超几何分布抽样模型的一个著名例子是费希尔的红茶试验. 英国人喝红茶时常加入牛奶,有些人是先将红茶倒入杯中,然后再加入牛奶;而有些人则相反,先倒入牛奶,再倒入红茶. 费希尔对一位妇女是否能区别这两种冲茶方法的味道进行了试验. 将4杯先倒入牛奶和4杯后倒入牛奶的红茶给一位妇女品尝,该妇女事先知道这8杯中两种冲茶方法各4杯,因此,判断结果必然是各4杯. 本试验得到的数据如表6-3所示,两边缘和都为事前固定的常数.

表 6-3

事实	判断		和
	先奶	后奶	
先奶	n_{11}	n_{12}	4
后奶	n_{21}	n_{22}	4
和	4	4	8

6.2 变量间相关联系的测度

随机变量 A 与 B 相互独立的充分必要条件是:对于所有的 i 和 j,都有

$$p_{ij} = p_{i+}p_{+j},$$

其中

$$p_{i+} = \sum_{j=1}^{J} p_{ij}, \quad p_{+j} = \sum_{i=1}^{I} p_{ij}.$$

这个条件等价于:对于所有的 i 和 j,都有

$$p_{i|j} = p_{i+},$$

其中 $p_{i|j} = P(A = i \mid B = j) = p_{ij}/p_{+j}$ 为条件概率,$p_{+j} > 0$.

考虑 A 为一个暴露因素,例如是否抽烟,$A = 1$ 表示抽烟,$A = 2$ 表示不抽烟;B 为一个响应,例如是否患肺癌,$B = 1$ 表示患肺癌,$B = 2$ 表示未患肺癌. 度量二者间相关联系强度的测度之一为相对风险(relative risk)

$$\mathrm{RR} = \frac{P(\text{患肺癌} \mid \text{抽烟})}{P(\text{患肺癌} \mid \text{不抽烟})} = \frac{p_{1|1}}{p_{1|2}}.$$

RR = 1 意味着是否抽烟与是否患肺癌相互独立,RR > 1 意味着抽烟是肺癌的危险因素,RR < 1 意味着抽烟对肺癌起到预防的作用.

另一个测度是风险差(risk difference)

$$\mathrm{RD} = P(\text{患肺癌} \mid \text{抽烟}) - P(\text{患肺癌} \mid \text{不抽烟}) = p_{1|1} - p_{1|2}.$$

RD = 0 意味着抽烟与肺癌相互独立,RD > 0 意味着抽烟是肺癌的危险因素,RD < 0 意味着抽烟对肺癌起到预防的作用.

流行病学的队列研究将研究的人群分为暴露组和非暴露组,在一定时期内观察两组的发病率,由此可以估计相对风险和风险差. 但是,对于罕见疾病,暴露组和非暴露组必须足够大,并且时间也相当长,否则,可能观察不到发病的个体. 对于罕见病的研究,为了节约研究费用和缩短时间,流行病学常采用病例对照的方法进行研究,针对一组病人,寻找一个未患该病的人群作为对照组,调查他们的暴露情况. 由于病例对照研究仅能得到给定患病状况下暴露情况的信息,因此,无论样本量有多大,都得不到相对风险的精确估计. 病例对照研究常采用下面的比值比(odds ratio)来度量两变量间的相关联系:

$$\text{OR} = \frac{P(\text{抽烟} \mid \text{患肺癌})/P(\text{不抽烟} \mid \text{患肺癌})}{P(\text{抽烟} \mid \text{未患肺癌})/P(\text{不抽烟} \mid \text{未患肺癌})}.$$

OR = 1 意味着抽烟与肺癌相互独立,OR > 1 意味着抽烟是肺癌的危险因素,OR < 1 意味着抽烟对肺癌起到预防的作用.

OR 可以改写为

$$\text{OR} = \frac{p_{11}p_{22}}{p_{12}p_{21}} = \frac{P(\text{抽烟},\text{患肺癌})P(\text{不抽烟},\text{未患肺癌})}{P(\text{抽烟},\text{未患肺癌})P(\text{不抽烟},\text{患肺癌})}$$

$$= \frac{P(\text{患肺癌} \mid \text{抽烟})}{P(\text{患肺癌} \mid \text{不抽烟})}\left(\frac{1 - P(\text{患肺癌} \mid \text{不抽烟})}{1 - P(\text{患肺癌} \mid \text{抽烟})}\right).$$

如果无论暴露还是不暴露,发病率都很低,即罕见病,那么

$$\frac{1 - P(\text{患肺病} \mid \text{不抽烟})}{1 - P(\text{患肺癌} \mid \text{抽烟})} \approx 1.$$

在此情况下,比值比可近似作为相对风险的估计,即 RR ≈ OR.

下面的四个条件是相互等价的:

(1) A 与 B 相互独立,即对于所有 i 和 j, $p_{ij} = p_{i+}p_{+j}$;

(2) RR = 1;

(3) RD = 0;

(4) OR = 1.

值得注意,除非是随机试验研究,上述的测度只能表示变量间相关性联系的强弱,而不能表示因果关系的强弱.根据观测研究进行因果推断时,必须慎重考虑,排除混杂影响.

RR, RD 和 OR 的样本估计分别为

$$\widehat{\text{RR}} = \frac{n_{11}/n_{1+}}{n_{21}/n_{2+}}, \qquad \widehat{\text{RD}} = \frac{n_{11}}{n_{1+}} - \frac{n_{21}}{n_{2+}}, \qquad \widehat{\text{OR}} = \frac{n_{11}n_{22}}{n_{12}n_{21}}.$$

6.3 独立性假设检验

本节介绍关于随机变量 A 与 B 相互独立的假设检验,称为**独立性假设检验**.假设

$$H_0: p_{ij} = p_{i+}p_{+j} \qquad (i = 1,2,\cdots,I; j = 1,2,\cdots,J),$$

其中 I 为变量 A 的水平个数, J 为变量 B 的水平个数.令 n_{i+} 和 n_{+j} 分别为 i 行和 j 列的频数和.零假设 H_0 下,期望频数的最大似然估计为

$$\widehat{m}_{ij} = \frac{n_{i+}n_{+j}}{N}.$$

对立假设为存在一个一般的相关, H_1: 存在某个 (i,j), $p_{ij} \neq p_{i+}p_{+j}$.下面所有的统计量都用于检验独立性零假设.

6.3.1 皮尔逊卡方统计量

皮尔逊卡方统计量注重观测频数与期望频数的差,统计量定义为

$$Q_{\mathrm{P}} = \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\frac{(n_{ij} - \widehat{m}_{ij})^2}{\widehat{m}_{ij}}.$$

Q_{P} 在零假设下渐近服从自由度为 $(I-1)(J-1)$ 的卡方分布．

6.3.2 连续性修正卡方统计量

耶茨(F.Yates)提出连续性修正卡方统计量

$$Q_{\mathrm{c}} = \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\frac{(|n_{ij} - \widehat{m}_{ij}| - 0.5)^2}{\widehat{m}_{ij}}.$$

在零假设下，Q_{c} 渐近服从自由度为 $(I-1)(J-1)$ 的卡方分布．

6.3.3 似然比卡方统计量

似然比卡方统计量注重观测频数与期望频数的比

$$G^2 = 2\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}n_{ij}\ln\frac{n_{ij}}{\widehat{m}_{ij}}.$$

在零假设下，G^2 渐近服从自由度为 $(I-1)(J-1)$ 的卡方分布．

6.3.4 费希尔精确检验

上述卡方统计量是在 N 很大时渐近服从卡方分布．当观测频数很小时，应采用精确检验方法．考虑 $I = J = 2$，对立假设为 H_1：OR $\neq 1$．在仅对参数 OR 的假设检验感兴趣的情况下，可根据行边缘总和与列边缘总和$(N_{1+}, N_{2+}, N_{+1}, N_{+2})$固定的超几何分布进行独立性假设检验．由观测频数 n_{11} 计算超几何分布的概率，其概率值为 $p_{\mathrm{obs}} = f(n_{11})$．双边检验的 p 值有几种计算方法．

(1) 对于 $k = L, L+1, \cdots, U$，$L = \max\{0, N_{+1} + N_{1+} - N\}$，$U = \min\{N_{+1}, N_{1+}\}$，计算相应的超几何概率值 $f(k)$，p 值等于所有小于等于 p_{obs} 的超几何概率值 $f(k)$ 之和，即

$$p = \sum_{k=L, f(k)\leqslant p_{\mathrm{obs}}}^{U} f(k),$$

其中 $f(k)$ 为超几何分布，求和是在 $f(k)$ 小于等于观测概率 p_{obs} 的条件下进行的．当 p 值小于显著水平 α 时，拒绝零假设；否则，零假设是相容的．

(2) 令 p_1 等于所有 $k = n_{11}, n_{11}+1, \cdots, U$ 的超几何概率 $f(k)$ 之和，即

$$p_1 = \sum_{k=n_{11}}^{U} f(k);$$

并且，令 p_2 等于所有 $k = L, L+1, \cdots, n_{11}$ 的超几何概率 $f(k)$ 之和，即

$$p_2 = \sum_{k=L}^{n_{11}} f(k).$$

如果 p_1 或 p_2 小于 $\alpha/2$，拒绝零假设；否则，零假设是相容的．

对于单边检验来说,当备择假设为 H_1:OR < 1时,p 值等于 p_2;当备择假设为 H_1:OR > 1时,p 值等于 p_1. 如果 p 值小于显著水平 α,则拒绝零假设;否则,零假设是相容的 .

关于 $I \times J$ 表的双边检验,可采用米特 - 派泰(Mehta-Patel)网络方法计算 p 值. 有些统计软件,如 SAS 系统,提供了该算法 .

7　2 × 2 × K 列联表

本章特别讨论有关 2 × 2 × K 列联表的分层分析方法 .

当某个研究仅关心两个二值变量间的相关联系时,仅仅根据两维表进行统计推断的话,可能会由于忽略了其他变量,造成虚假相关现象 . 为了消除其他变量对所关心的两变量间相关的影响,可采用分层分析方法,对不同层上的相关进行汇总 . 本章虽然仅从形式上考虑三个离散变量,但是,第三个 K 值变量可看做是多个变量的复合 .

7.1　辛普森悖论和标准化方法

假设得到如表 7-1 所示的关于吸烟与肺癌的调查数据,设想格内的频数都乘以同一个大的正整数,或者将其作为总体的分布比例,那么,相对风险

$$\mathrm{RR} = \frac{80/200}{100/200} = 0.80,$$

比值比

$$\mathrm{OR} = \frac{80 \times 100}{100 \times 120} = 0.67,$$

风险差

$$\mathrm{RD} = \frac{80}{200} - \frac{100}{200} = -0.10.$$

由此看出吸烟人群的患癌率比不吸烟人群的患癌率低,吸烟似乎是一个预防因素 . 假若调查还记录了性别,根据性别分层的数据,如表 7-2 的 2 × 2 × 2 列联表所示,男性的相对风险 $\mathrm{RR}_1 = 1.17$,比值比 $\mathrm{OR}_1 = 1.56$,风险差 $\mathrm{RD}_1 = 0.10$;女性的相对风险 $\mathrm{RR}_2 = 1.50$,比值比 $\mathrm{OR}_2 = 1.71$,风险差 $\mathrm{RD}_2 = 0.10$. 由此看出吸烟似乎变成患肺癌的危险因素了 . 由表 7-1 和表 7-2 得出吸烟分别对男性和女性都有害处,但是对人却有好处,这种现象称为**辛普森**(T. Simpson) **悖论**. 进一步假设调查还记录了年龄,分为 40 岁以下和 40 岁以上两个水平 . 得到表 7-3 所示的 2 × 2 × 4 列联表,那么由表 7-3 会发现吸烟对于各个性别年龄层的人都又似乎变为预防因素了. 这表明,调查设计和统计分析都需要认真考虑背景变量;否则,可能得出虚假相关的错误结论 .

表 7-1

	患肺癌	未患肺癌	行总和
吸烟	80	120	200
不吸烟	100	100	200

RR = 0.80

OR = 0.67

RD = −0.10

表 7-2

	男性		女性	
	患肺癌	未患肺癌	患肺癌	未患肺癌
吸烟	35	15	45	105
不吸烟	90	60	10	40

$RR_1 = 1.17$　　$RR_2 = 1.50$

$OR_1 = 1.56$　　$OR_2 = 1.71$

$RD_1 = 0.10$　　$RD_1 = 0.10$

表 7-3

年龄	≤40岁				>40岁			
性别	男		女		男		女	
	患癌	未患癌	患癌	未患癌	患癌	未患癌	患癌	未患癌
吸烟	5	5	40	50	30	10	5	55
不吸烟	60	55	5	5	30	5	5	35

$RR_{11} = 0.96$　　$RR_{12} = 0.89$　　$RR_{21} = 0.88$　　$RR_{22} = 0.67$

$OR_{11} = 0.92$　　$OR_{12} = 0.80$　　$OR_{21} = 0.50$　　$OR_{22} = 0.64$

$RD_{11} = -0.02$　　$RD_{12} = -0.06$　　$RD_{21} = -0.11$　　$RD_{22} = -0.04$

1973年加利福尼亚大学伯克莱分校针对研究生入学中是否存在性别歧视进行了观测研究．性别与录取的数据如表7-4所示．男生录取率约44%，而女生录取率约35%，似乎存在性别歧视的问题．但是，根据学生报考的专业分层后，发现每个专业都不存在性别歧视问题，即使存在，也是排挤男生．表7-5给出一部分专业的数据，表中的6个专业的考生占全校100多个专业总考生人数的1/3以上．由此看出表面上女生录取率比男生录取率低是因为女生比男生更偏爱报考录取率低的专业．为了排除男生与女生报考专业分布的不同带来的影响，可以选择一个标准的报考专业分布，如选择表7-5中最后一行，将报考各专业的人数的分布作为标准分布．以该分布为标准，对男生和女生的报考分布进行修正．男生的修正后的标准化录取率为：

$$(0.62\times933+0.63\times585+0.37\times918+0.33\times792+0.28\times584+0.06\times714)/4526=0.39.$$

表 7-4

	录取	未录取	总和
男生／人	3738	4704	8442
女生／人	1494	2827	4321

表 7-5

专业	A	B	C	D	E	F
男生申请人数／人	825	560	325	417	191	373
录取百分数／%	62	63	37	33	28	6
女生申请人数／人	108	25	593	375	393	341
录取百分数／%	82	68	34	35	24	7
申请人数之和／人	933	585	918	792	584	714

女生的修正后的标准化录取率为：

$$(0.82\times933+0.68\times585+0.34\times918+0.35\times792+0.24\times584+0.07\times714)/4526=0.43.$$

标准化录取率排除了专业分布带来的混杂影响后，发现女生的标准化录取率略高于男生的标准化录取率.

7.2 公共相关测度的估计

考虑两个二值随机变量 A 和 B，一个 K 值随机变量 C. 令 p_{ijk} 和 n_{ijk} 分别表示 (i,j,k) 格内的概率 $P(A=i,B=j,C=k)$ 和观测频数. 对于 $C=k$ 的层，该层的相对风险和比值比分别定义如下：

$$\mathrm{RR}_k=\frac{P(B=1\mid A=1,C=k)}{P(B=1\mid A=2,C=k)},$$

$$\mathrm{OR}_k=\frac{P(A=1,B=1\mid C=k)P(A=2,B=2\mid C=k)}{P(A=1,B=2\mid C=k)P(A=2,B=1\mid C=k)}.$$

当各层的某种相关测度相等时，如 $\mathrm{RR}_1=\mathrm{RR}_2=\cdots=\mathrm{RR}_k=\mathrm{CRR}$，称 CRR 为公共相对风险. 类似地，可以定义公共比值比 COR. 下面仅给出公共相对风险 CRR 和公共比值比 COR 的曼特尔 - 亨赛尔(Mantel-Haenszel) 估计和对数单位(Logit) 估计. 它们的最大似然估计不能由显式表示，可以采用无三因子交互项的对数线性模型计算公共比值比 COR 的估计，参见第 8 章.

7.2.1 曼特尔 - 亨塞尔估计

CRR 和 COR 的曼特尔 - 亨塞尔估计分别为

$$\widehat{\mathrm{RR}}_{\mathrm{MH}}=\frac{\frac{1}{n_{++k}}\sum_k n_{11k}n_{2+k}}{\frac{1}{n_{++k}}\sum_k n_{21k}n_{1+k}},$$

$$\widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{MH}}=\frac{\frac{1}{n_{++k}}\sum_k n_{11k}n_{22k}}{\frac{1}{n_{++k}}\sum_k n_{12k}n_{21k}},\tag{7-1}$$

其中，频数下标中的“+”表示在相应下标上频数求和，例如，$n_{i+k}=\sum_j n_{ijk}$.

公共相关测度的置信区间有很多种近似，下面给出一个近似式. 令 z 为标准正态分布 $N(0,1)$ 的 $100(1-\alpha/2)$ 百分位点. Q 为下一节将给出的柯克伦 - 曼特尔 - 亨塞尔(Cochran-Mantel-Haenszel) 统计量. 公共相对风险 CRR 的 $100(1-\alpha)\%$ 百分置信区间为：

如果 $\widehat{\mathrm{RR}}_{\mathrm{MH}}>1$，则为

$$\left[\widehat{\mathrm{RR}}_{\mathrm{MH}}^{\,1-z/\sqrt{Q}},\widehat{\mathrm{RR}}_{\mathrm{MH}}^{\,1+z/\sqrt{Q}}\right],$$

当$\widehat{\mathrm{RR}}_{\mathrm{MH}} \leqslant 1$时,交换该区间的上下界.

公共比值比 COR 的 $100(1-\alpha)\%$ 百分置信区间为:

如果$\widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{MH}} > 1$,则为

$$\left[\widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{MH}}{}^{1-z/\sqrt{Q}}, \widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{MH}}{}^{1+z/\sqrt{Q}}\right],$$

当$\widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{MH}} \leqslant 1$时,交换该区间的上下界.

7.2.2 对数单位估计

CRR 和 COR 的对数单位估计分别为:

$$\widehat{\mathrm{RR}}_{\mathrm{L}} = \exp\left(\frac{\sum_k \omega_k \ln \widehat{\mathrm{RR}}_k}{\sum_k \omega_k}\right),$$

其中

$$\omega_k = [\widehat{\mathrm{var}}(\ln \widehat{RR}_k)]^{-1} = \frac{1}{n_{11k}} - \frac{1}{n_{1+k}} + \frac{1}{n_{21k}} - \frac{1}{n_{2+k}};$$

$$\widehat{\mathrm{RR}}_k = \frac{(n_{11k}/n_{1+k})}{(n_{21k}/n_{2+k})};$$

$$\widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{L}} = \exp\left(\frac{\sum_k \omega'_k \ln \mathrm{OR}_k}{\sum_k \omega'_k}\right),$$

其中 $\omega'_k = [\widehat{\mathrm{var}}(\ln \widehat{\mathrm{OR}}_k)]^{-1} = \frac{1}{n_{11k}} + \frac{1}{n_{12k}} + \frac{1}{n_{21k}} + \frac{1}{n_{22k}};$

$$\widehat{\mathrm{OR}}_k = \frac{(n_{11k}n_{22k})}{(n_{12k}n_{21k})}.$$

公共相对风险 CRR 和公共比值比 COR 的 $100(1-\alpha)\%$ 百分置信区间分别为:

$$\left[\widehat{\mathrm{RR}}_{\mathrm{L}}\exp\left(-\frac{z}{\sqrt{\sum_k \omega_k}}\right), \widehat{\mathrm{RR}}_{\mathrm{L}}\exp\left(\frac{z}{\sqrt{\sum_k \omega_k}}\right)\right],$$

$$\left[\widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{L}}\exp\left(-\frac{z}{\sqrt{\sum_k \omega_k'}}\right), \widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{L}}\exp\left(\frac{z}{\sqrt{\sum_k \omega_k'}}\right)\right].$$

7.3 独立性假设检验

本节讨论消除背景变量对两个二值变量独立性假设检验的影响.下面先介绍几种汇总统计量.

7.3.1 柯克伦-曼特尔-亨塞尔统计量

假定各层是相互独立的,并且每层的行和列边缘频数固定,相关程度也大体一

致．零假设 H_0：在变量 C 定义的任一层上，变量 A 都与变量 B 条件独立，即对于所有 i,j 和 k，都有 $p_{ij|k}=p_{i+|k}p_{+j|k}$．对立假设为零假设不成立．在零假设下，对应的模型是重超几何分布，则**柯克伦－曼特尔－亨塞尔统计量**

$$Q=\frac{\left(\sum_{k=1}^{K}n_{11k}-\frac{1}{n_{++k}}\sum_{k=1}^{K}n_{1+k}n_{+1k}\right)^2}{\frac{1}{(n_{++k}-1)n_{++k}^2}\sum_{k=1}^{K}n_{1+k}n_{2+k}n_{+1k}n_{+2k}}.$$

当零假设 H_0 为真时，Q 统计量渐近服从自由度为 1 的卡方分布．连续性修正统计量

$$Q'=\frac{\left(\left|\sum_{k=1}^{K}n_{11k}-\frac{1}{n_{++k}}\sum_{k=1}^{K}n_{1+k}n_{+1k}\right|-\frac{1}{2}\right)^2}{\frac{1}{(n_{++k}-1)n_{++k}^2}\sum_{k=1}^{K}n_{1+k}n_{2+k}n_{+1k}n_{+2k}}.$$

注意，当某些层的相关方向与另一些层的相关方向相反时，Q 和 Q' 统计量的检验功效会变低．

7.3.2 基于对数线性模型的检验

零假设为变量 C 定义的每一层上都有变量 A 与变量 B 条件独立，即

$$H_0:\mathrm{OR}_1=\mathrm{OR}_2=\cdots=\mathrm{OR}_K=\mathrm{COR}=1.$$

在第 8 章将介绍该零假设对应于无 A 与 B 二因子交互项的层次对数线性模型 $[AC][BC]$；对立假设为各层比值比相等，但不条件独立，即 $H_1:\mathrm{OR}_1=\mathrm{OR}_2=\cdots=\mathrm{OR}_K=\mathrm{COR}\neq 1$，对应于无三因子交互项的层次对数线性模型 $[AB][AC][BC]$．检验给定 C 下 A 与 B 条件独立性的似然比检验统计量为

$$G^2=2\sum_{k=1}^{K}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2}\hat{m}_{ijk}^{(1)}\ln\frac{\hat{m}_{ijk}^{(1)}}{\hat{m}_{ijk}^{(0)}},$$

其中 $\hat{m}_{ijk}^{(h)}$ 为在 H_h 下期望频数 m_{ijk} 的最大似然估计，计算方法见第 8 章．当零假设 H_0 为真时，G^2 统计量渐近服从自由度为 1 的卡方分布．

7.3.3 条件独立性的精确检验

类似 2×2 的费希尔精确检验，基于每层的行和列边缘频数固定下的超几何分布，计算 K 个层的左上角频数为 $\{n_{11k},k=1,2,\cdots,K\}$ 的超几何分布的概率乘积，这个乘积的概率值可表示为

$$g(n_{11k},k=1,2,\cdots,K)=\prod_k f(n_{11k}),$$

其中 $f(n_{11k})$ 为超几何分布概率．表示所有可能的 K 个层的左上角频数为 $\{n'_{11k},k=1,2,\cdots,K\}$，且这些频数之和为 $h\left(即\sum_{k=1}^{K}n'_{11k}=h\right)$ 的乘积超几何分布概率之

和为

$$g_{+}(h)=\sum_{n'_{11+}+\cdots+n'_{11K}=h} g(n'_{11k},k=1,2,\cdots,K).$$

根据观测频数的和 $n_{11+}=\sum_{k=1}^{K} n_{11k}$ 进行精确检验．令 p_1 等于所有可能的 $h \geqslant n_{11+}$ 的乘积超几何概率 $g_{+}(h)$ 之和，即

$$p_1=\sum_{h \geqslant n_{11+}} g_{+}(h).$$

并且，令 p_2 等于所有可能的 $h \leqslant n_{11+}$ 的乘积超几何概率 $g(h)_{+}$ 之和，即

$$p_2=\sum_{h \leqslant n_{11+}} g(h)_{+}.$$

如果 p_1 或 p_2 小于 $\alpha/2$，那么拒绝零假设；否则，零假设是相容的．

对于单边检验来说，当 H_1:COR <1，p 值等于 p_2；当 H_1:COR >1，p 值等于 p_1．当 p 值小于显著水平 α 时，拒绝零假设；否则，零假设是相容的．

7.4 同质性假设检验

当某种相关测度在各层都相等时，称该测度在各层上具有同质性．

7.4.1 比值比同质的布雷斯洛－戴检验

零假设为以变量 C 定义的每一层上的比值比相等，即

$$H_0:\mathrm{OR}_1=\mathrm{OR}_2=\cdots=\mathrm{OR}_K.$$

对立假设 H_1 为 H_0 不成立．布雷斯洛－戴(Breslow-Day)检验统计量为

$$Q_{\mathrm{BD}}=\sum_{k=1}^{K}\frac{(n_{11k}-\widetilde{m}_{11k})^2}{\widehat{V}_{11k}},$$

其中 $\widetilde{m}_{11k}$ 为方程

$$\frac{\widetilde{m}_{11k}[n_{2+k}-n_{+1k}+\widetilde{m}_{11k}]}{[n_{1+k}-\widetilde{m}_{11k}][n_{+1k}-\widetilde{m}_{11k}]}=\widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{MH}}$$

的解，$\widehat{\mathrm{OR}}_{\mathrm{MH}}$ 由式(7-1)给出；

$$\widehat{V}_{11k}=\left[\frac{1}{\widetilde{m}_{11k}}+\frac{1}{n_{1+k}-\widetilde{m}_{11k}}+\frac{1}{n_{+1k}-\widetilde{m}_{11k}}+\frac{1}{n_{2+k}-n_{+1k}+\widetilde{m}_{11k}}\right]^{-1}.$$

当零假设 H_0 为真时，Q_{BD} 统计量渐近服从自由度为 $K-1$ 的卡方分布．

7.4.2 比值比同质的对数线性模型检验

零假设为

$$H_0:\mathrm{OR}_1=\mathrm{OR}_2=\cdots=\mathrm{OR}_K,$$

对应于无二因子交互项的对数线性模型[AB][AC][BC]. 对立假设 H_1 为 H_0 不成立. 似然比检验统计量为

$$G^2 = 2\sum_{k=1}^{K}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2} n_{ijk}\ln\frac{n_{ijk}}{\widehat{m}_{ijk}},$$

其中 $\widehat{m}_{ijk}$ 为在H_0 下期望频数 m_{ijk} 的最大似然估计,其计算方法见第8章. 当零假设 H_0 为真时,G^2 统计量渐近服从自由度为 $K-1$ 的卡方分布.

7.5 相关测度的可压缩性

如果公共的相关测度与合并 K 个表得到的边缘表的相关测度相等,那么称该测度是简单可压缩的,或简称可压缩的. 例如,令 $OR_+ = p_{11+}p_{22+}/(p_{12+}p_{21+})$ 表示合并 K个表后得到的边缘表上的比值比. 当$OR_1 = OR_2 = \cdots = OR_K = COR = OR_+$ 时,称比值比是可压缩的. 在可压缩的情况下,可避免辛普森悖论现象,并且,可以在压缩后的边缘表上更有效地进行有关相关测度的统计推断. 如果公共的相关测度与合并任意的若干个表得到的部分边缘表的相关测度相等,那么称该测度是强可压缩的. 例如,对于任意 $\omega\subseteq\{1,2,\cdots,K\}$,都有 $OR_\omega = OR_+$ 时,称比值比是强可压缩的,这里$OR_\omega = p_{11\omega}p_{22\omega}/(p_{12\omega}p_{21\omega})$表示合并$\omega$中对应的各层表得到的部分边缘表上的比值比,$p_{ij\omega} = \sum_{k\in\omega}p_{ijk}$. 可压缩性对于调查方案设计和数据分析阶段考虑是否需要包括哪些背景变量,哪些背景变量可被忽略的问题,以及对于来自不同调查的数据是否可以合在一起进行分析等问题,提出了一种标准. 强可压缩性对如何划分背景变量的水平提出了一种方法. 假定所有(i,j,k)格内的概率 $p_{ijk}>0$. 下面给出有关各种相关测度简单可压缩性和强可压缩性的条件.

7.5.1 相对风险

相对风险简单可压缩(即 $RR_1 = RR_2 = \cdots = RR_K = RR_+$)的两个充分条件:

1° 给定B下,A与C条件独立;

2° B与C边缘独立,且 $RR_1 = RR_2 = \cdots = RR_K$.

当上面的条件 1° 和 2° 之一成立时,相对风险就是简单可压缩的.

下面条件 3° 与条件 2° 等价:

3° B与C边缘独立,且给定A下,B与C条件独立.

相对风险强可压缩(即对于任意 $\omega\subseteq\{1,2,\cdots,K\}$,$RR_\omega = RR_+$)的充分必要条件是:

1° 给定B下,A与C条件独立;或

2° B与C边缘独立,且 $RR_1 = RR_2 = \cdots = RR_K$.

当上面的条件 1° 和 2° 之一成立时,相对风险就是强可压缩的,并且强可压缩时,条件 1° 和 2° 至少有一个必定成立.

7.5.2 风险差

风险差简单可压缩(即 $RD_1 = RD_2 = \cdots = RD_K = RD_+$)的两个充分条件:

1° 给定 B 下,A 与 C 条件独立;

2° B 与 C 边缘独立,且 $RD_1 = RD_2 = \cdots = RD_K$.

风险差强可压缩(即对于任意 $\omega \subseteq \{1,\cdots,K\}$,$RD_\omega = RD_+$)的充分必要条件是:

1° 给定 B 下,A 与 C 条件独立;或

2° B 与 C 边缘独立,且 $RD_1 = RD_2 = \cdots = RD_K$.

7.5.3 比值比

比值比简单可压缩(即 $OR_1 = OR_2 = \cdots = OR_K = OR_+$)的两个充分条件:

1° 给定 B 下,A 与 C 条件独立;

2° 给定 A 下,B 与 C 条件独立.

比值比强可压缩(即对于任意 $\omega \subseteq \{1,\cdots,K\}$,$OR_\omega = OR_+$)的充分必要条件是:

1° 给定 B 下,A 与 C 条件独立;或

2° 给定 A 下,B 与 C 条件独立.

8 对数线性模型

对数线性模型是描述多个离散型变量之间相互关联的模型.它将所有随机变量都当作响应变量等同对待,通过模型中的参数来描述变量相互之间的各种交互作用.

8.1 三维对数线性模型

令 A,B 和 C 分别是水平数为 I,J 和 K 的离散型随机变量,分别将变量编号为1,2,3. 令 m_{ijk} 为(i,j,k)格中的期望频数.三维的饱和对数线性模型为

$$\ln m_{ijk} = u + u_{1(i)} + u_{2(j)} + u_{3(k)} + u_{12(ij)} + u_{13(ik)} + u_{23(jk)} + u_{123(ijk)},$$

其中

$$\sum_i u_{1(i)} = \sum_j u_{2(j)} = \sum_k u_{3(k)} = 0,$$

$$\sum_i u_{12(ij)} = \sum_j u_{12(ij)} = \sum_i u_{13(ik)} = \sum_k u_{13(ik)} = \sum_j u_{23(jk)} = \sum_k u_{23(jk)} = 0,$$

$$\sum_i u_{123(ijk)} = \sum_j u_{123(ijk)} = \sum_k u_{123(ijk)} = 0.$$

u 为平均效应;u_1,u_2,u_3 分别为 A,B,C 的主效应;u_{12},u_{13},u_{23} 分别为 A 和B,A 和 C,B 和C 的两因子交互效应;u_{123} 为 A,B,C 的三因子交互效应.常采用高次交互项来简单表示一个模型,称为生成类表示法.这个三维饱和对数线性模型用生成类表示为[123],或[ABC],这里采用前者的表示方法.

注意:这里的交互效应仅是对数线性模型意义上的交互,它们表示几个因素同时出现时,对期望频数的对数的联合影响．当对作为生物交互等实际应用中的交互作用进行解释时,一定要慎重考虑在实际问题中的真正含义．

饱和模型下,期望频数的最大似然估计为

$$\hat{m}_{ijk} = n_{ijk} \qquad (\forall\, i,j,k).$$

对数线性模型中有的效应为零时,称为非饱和对数线性模型．在一个模型中,如果一组变量的交互项为零时,包含该变量组的更高次交互项一定为零,称该模型为层次对数线性模型．例如,模型

$$\ln m_{ijk} = u + u_{1(i)} + u_{23(jk)}$$

就不是层次对数线性模型,因为它无 u_2 项,但有含变量 2 的高次交互项 u_{23}.

这里仅讨论常用的层次对数线性模型,也简称为对数线性模型．层次对数线性模型可以用生成类唯一表示．无三因子交互项 u_{123},且无两因子交互项 u_{13} 的非饱和对数线性模型为

$$\ln m_{ijk} = u + u_{1(i)} + u_{2(j)} + u_{3(k)} + u_{12(ij)} + u_{23(jk)},$$

它是一个层次对数线性模型,用生成类表示为[12][23]. 该模型隐含:给定变量 2 下,变量 1 与变量 3 条件独立．该模型下的期望频数的最大似然估计为

$$\hat{m}_{ijk} = \frac{n_{ij+}\,n_{+jk}}{n_{+j+}} \qquad (\forall\, i,j,k).$$

无三因子交互的非饱和对数线性模型为

$$\ln m_{ijk} = u + u_{1(i)} + u_{2(j)} + u_{3(k)} + u_{12(ij)} + u_{13(ik)} + u_{23(jk)},$$

其中效应的约束条件与饱和模型的条件相同．它是一个层次对数线性模型,用生成类表示为[12][13][23]. 该模型下的期望频数的最大似然估计不能用显式表示,其似然方程为

$$\hat{m}_{ij+} = n_{ij+}, \qquad \hat{m}_{i+k} = n_{i+k}, \qquad \hat{m}_{+jk} = n_{+jk}.$$

可采用下面的迭代算法计算期望频数的最大似然估计．

第一步:置初始值．对于所有 i,j,k,令

$$\hat{m}_{ijk}^{(0)} = 1,$$

令 $t = 0$.

第二步:对于所有 i,j,k,

$$\hat{m}_{ijk}^{(3t+1)} = \frac{n_{ij+}}{\hat{m}_{ij+}^{(3t)}}\hat{m}_{ijk}^{(3t)}.$$

第三步:对于所有 i,j,k,

$$\hat{m}_{ijk}^{(3t+2)} = \frac{n_{i+k}}{\hat{m}_{i+k}^{(3t+1)}}\hat{m}_{ijk}^{(3t+1)}.$$

第四步:对于所有 i,j,k,

$$\hat{m}_{ijk}^{(3t+3)} = \frac{n_{+jk}}{\hat{m}_{+jk}^{(3t+2)}}\hat{m}_{ijk}^{(3t+2)}.$$

重复第二、三、四步，迭代直至估计值收敛为止．

8.2 高维对数线性模型

本节介绍多个离散型变量的对数线性模型．为简单起见，假定模型中含所有主效应．当缺少某些主效应时，可以将模型降维，使其含所有主效应．对于高维层次对数线性模型，常采用生成类表示该模型，它列出所有最高维互不包含的交互项．例如，$E=\{[12],[13],[23]\}$ 是无三因子交互项的对数线性模型．$E=\{e_1,e_2,\cdots,e_S\}$ 为生成类的表示方法，其中，每一元素是变量的子集合．例如，如果生成类中有[12] 的话，则意味着 u_{12} 在该模型中，但 u_{123} 不在该模型中．

令 $\boldsymbol{i}$ 表示多维列联表的下标向量，表示表中的一个格子．当 e 为一变量集合时，$\boldsymbol{i}_e$ 表示集合 e 中所有变量构成的边缘列联表中的一个格子．有些对数线性模型的最大似然估计有显式表示，但有些无显式表示．对于生成类为 $E=\{e_1,e_2,\cdots,e_S\}$ 的对数线性模型，可以采用下面迭代算法计算期望频数的最大似然估计．

第一步：置初始值．对于所有 $\boldsymbol{i}$，令

$$\widehat{m}_{\boldsymbol{i}}^{(0)}=1,$$

令 $t=0$.

第二步：对于所有 $\boldsymbol{i}$，

$$\widehat{m}_{\boldsymbol{i}}^{(t+1)}=\frac{n_{\boldsymbol{i}_{e1}}}{\widehat{m}_{\boldsymbol{i}_{e1}}^{(t)}}\widehat{m}_{\boldsymbol{i}}^{(t)},$$

其中 $\widehat{m}_{\boldsymbol{i}_{e1}}^{(t)}$ 是 $\widehat{m}_{\boldsymbol{i}}^{(t)}$ 的边缘和，即由集合 e_1 中的变量构成的边缘表中期望频数的估计.

第三步：对于所有 $\boldsymbol{i}$，

$$\widehat{m}_{\boldsymbol{i}}^{(t+2)}=\frac{n_{\boldsymbol{i}_{e2}}}{\widehat{m}_{\boldsymbol{i}_{e2}}^{(t+1)}}\widehat{m}_{\boldsymbol{i}}^{(t+1)}.$$

…………

第 $S+1$ 步：对于所有 $\boldsymbol{i}$，

$$\widehat{m}_{\boldsymbol{i}}^{(t+S)}=\frac{n_{\boldsymbol{i}_{eS}}}{\widehat{m}_{\boldsymbol{i}_{eS}}^{(t+S-1)}}\widehat{m}_{\boldsymbol{i}}^{(t+S-1)}.$$

重复第二至 $S+1$ 步，迭代直至估计值收敛为止．

8.3 对数线性模型的拟合度检验

检验某个对数线性模型是否拟合观测频数，常采用拟合度检验．

(1) 皮尔逊卡方检验统计量

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(\text{观测频数} - \text{期望频数估计})^2}{\text{期望频数估计}},$$

其中求和的范围是所有格子 i.

(2) 对数似然比检验统计量

$$G^2 = 2\sum_i \text{观测频数}\ \ln\left(\frac{\text{观测频数}}{\text{期望频数估计}}\right).$$

观测频数为 n_i,期望频数估计为该模型下的期望频数的最大似然估计 $\widehat{m}_i$. 当模型为真,且样本量足够大时,统计量 χ^2 和 G^2 都渐近服从卡方分布,其自由度

$$\mathrm{df} = \text{表中格子个数} - \text{自由参数个数}.$$

例如,$I \times J \times K$ 表中有 IJK 个格子,模型{[1],[2],[3]}有 1 个参数 u,$(I-1)$ 个自由参数 u_1,$(J-1)$ 个自由参数 u_2,$(K-1)$ 个自由参数 u_3,所以,自由度等于 $IJK - I - J - K + 2$.

假定一个模型 M_1 合理地拟合观测频数,准备进一步检验该模型的某个子模型 M_0(即模型 M_1 中某些效应为零的模型)是否拟合观测频数,则零假设为 $H_0: M_0$,对立假设为 $H_1: M_1$.

(1) 皮尔逊卡方检验统计量

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(M_1\ \text{下的期望频数估计} - M_0\ \text{下的期望频数估计})^2}{M_0\ \text{下的期望频数估计}}.$$

(2) 对数似然比检验统计量

$$G^2 = 2\sum_i \text{观测频数}\ \ln\left(\frac{M_1\ \text{下的期望频数估计}}{M_0\ \text{下的期望频数估计}}\right).$$

统计量 χ^2 和 G^2 都渐近服从卡方分布,其自由度

$$\mathrm{df} = M_1\ \text{中自由参数个数} - M_0\ \text{中自由参数个数}.$$

对数线性模型选择的方法类似于回归模型的选择,也有前进法、后退法和逐步法等几种方法. 在对数线性模型选择时,常采用上面给出的两个模型相比较的拟合度检验统计量,它比直接检验模型 M_0 是否拟合观测频数的方法更有效. 前进法从主效应模型开始,每次增加一项最显著改善当前拟合度的效应,直至选出最合适的模型为止. 后退法从饱和模型开始,每次减少一项最少降低当前拟合度的效应,直至选出最合适的模型为止. 逐步法首先检验含所有主效应的模型 M_1,含所有两因子交互效应的模型 M_2,… 直至合理拟合数据的含所有 T 个因子交互效应模型 M_T 为止;然后,从模型 M_{T-1} 开始将前进法和后退法结合,增加一项最显著改善当前拟合度的效应之后,考虑减少一项最少降低当前拟合度的效应;反复前进和后退,直至选出最合适的模型为止.

8.4 图 模 型

当变量个数很多时,图可作为一种方便的工具,将变量间的相互联系清楚地描绘出来;图也可作为各领域的专家与统计专家交流的工具.

可利用图表示变量间条件独立性．设一个图

$$G = \{V, E\},$$

其中 V 为点集合，每个点表示一个变量；$E = \{e_1, e_2, \cdots, e_S\}$ 为无向边集合，边 $e_S = \{i, j\}$ 是连接点 i 和点 j 的边．如果两个点被一条边连接，则称这两个点是邻接的；如果图中任意两个点都是邻接的，则称该图是完全图．当图中缺少一条边，比如，点 i 和点 j 间缺少边时，表示给定所有其他变量 $V \setminus \{i, j\}$ 下，变量 i 与变量 j 条件独立．

由一个变量子集合 A 生成的子图为

$$G_A = \{A, E_A\},$$

其中

$$A \subseteq V; \quad E_A = \{e : e \in E, e \subseteq A\}.$$

令 A 和 B 是两个变量子集合，$C = A \cap B$．如果 $A \cup B = V$ 和 $E = E_A \cup E_B$，并且 C 在图 G 中为一个完全子图的点集合，那么，称图 G 可分解为两个子图 G_A 和 G_B．例如，考虑图 $G = \{V, E\}$，其中，变量集合 $V = \{1,2,3,4\}$，边集合 $E = \{\{1,2\}, \{1,3\}, \{2,3\}, \{2,4\}, \{3,4\}\}$，如图 8-1 所示．令 $A = \{1,2,3\}$ 和 $B = \{2,3,4\}$，那么，$E_A = \{\{1,2\}, \{1,3\}, \{2,3\}\}$，$E_B = \{\{2,3\}, \{2,4\}, \{3,4\}\}$．子图 G_A 和 G_B 分别如图 8-2(a)，(b) 所示．可知图 G 可分解为子图 G_A 和子图 G_B．

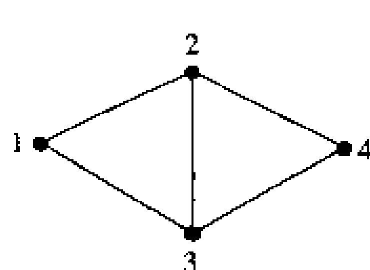
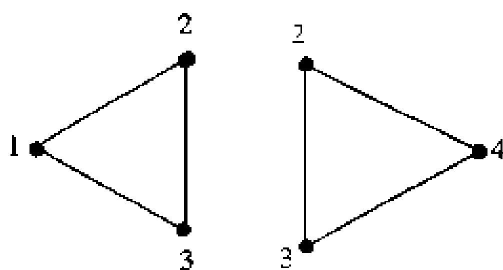


图 G

图 8-1



(a)图 G_A (b)图 G_B

图 8-2

将一个图中最大完全子图的点集的集合作为层次对数线性模型的生成类，构成的一类模型称为**图模型**．例如，考虑四个变量 1,2,3,4．图 G 如图 8-1 所示，边集合 $E = \{1,2\}, \{1,3\}, \{2,3\}, \{2,4\}, \{3,4\}$ 对应的层次对数线性模型生成类为 [123][234]，该模型是一个图模型．设一个层次对数线性模型生成类为 [12][13][23][24][34]，因为不存在一个图的最大完全子图对应该生成类，如 [123]，所以，它不是图模型．由此看出，图模型一定是层次对数线性模型，而层次对数线性模型不一定是图模型．

如果一个图 G 可分解为两个子图 G_A 和 G_B，那么，称图 G 对应的图模型可分解为子图 G_A 和 G_B 对应的两个图模型．当图可分解为两个子图时，图 G 模型的最大似然估计 $\widehat{m}_i^G$ 可由两个子图 G_A 模型和 G_B 模型的最大似然估计得到：

$$\widehat{m}_i^G = \frac{\widehat{m}_{i_A}^{G_A}\widehat{m}_{i_B}^{G_B}}{n_{i_C}},$$

其中 n_{i_C} 为集合 C 中所有变量构成的边缘列联表中细胞 i_C 中的观测频数；$\widehat{m}_{i_A}^{G_A}$ 和 $\widehat{m}_{i_B}^{G_B}$ 为子图 G_A 和 G_B 模型下细胞 i_A 和 i_B 中频数的最大似然估计．

根据模型的分解，可将一个高维图模型的估计和检验问题分解为低维图模型的估计和检验问题．

可分解图模型递归定义如下：

(1) 完全图表示一个饱和模型，它是可分解图模型；

(2) 如果一个图模型可分解为两个可分解图模型，那么，它是一个可分解图模型．

由可分解图模型递归定义和模型分解的最大似然估计关系式，可以将可分解模型的最大似然估计表示为若干个饱和模型的最大似然估计的乘积．变量集合为 A 的饱和模型的最大似然估计 $\widehat{m}_{i_A} = n_{i_A}$，因此，可分解图模型的最大似然估计有显式表示，即可以直接估计，不必迭代计算．

如果图中所有四条或四条以上的边连成的环，都存在一条边连接该环上两个不相邻的点，则称该图为三角化图．一个三角化图对应一个可分解图模型．

9 对数单位模型

对数线性模型和**对数单位(logit)模型**都是描述离散型变量之间相互关联的模型．对数线性模型将所有随机变量都当作响应变量等同对待，研究变量之间的相互关系；而对数单位模型将变量区分为一个响应变量，其余的变量当作说明变量对待，研究说明变量对响应变量的效应，不关心说明变量之间的相互关联，将说明变量组成的边缘表的频数看做是固定的．

为简单起见，本节通过三个变量来介绍对数单位模型．令两个变量 A 和 B 分别是 I 值和 J 值的说明变量，编号为 1 和 2；变量 C 为二值响应变量，编号为 3. 对数单位定义为

$$\text{logit}_{ij} = \ln\frac{m_{ij1}}{m_{ij2}} = \ln\frac{P(C=1 \mid A=i, B=j)}{P(C=2 \mid A=i, B=j)},$$

其中 m_{ijk} 为 (i,j,k) 格中的期望频数；$P(C=k \mid A=i, B=j)$ 为给定 $A=i$ 和 $B=j$ 下 $C=k$ 的条件概率．饱和对数单位模型为

$$\text{logit}_{ij} = w + w_{1(i)} + w_{2(j)} + w_{12(ij)},$$

其中 w_1，w_2 和 w_{12} 有类似对数线性模型的 u 交互效应的约束，即求和等于零．由对数单位定义，可以得到对数单位模型的参数与对数线性模型的参数之间的关系．例如，由对数线性模型[12][13][23] 可以得到下面的对数单位模型：

$$\begin{aligned}\text{logit}_{ij} &= \ln\frac{m_{ij1}}{m_{ij2}} = (u_{3(1)} - u_{3(2)}) + (u_{13(i1)} - u_{13(i2)}) + (u_{23(j1)} - u_{23(j2)}) \\ &= 2(u_{3(1)} + u_{13(i1)} + u_{23(j1)}) \\ &= w + w_{1(i)} + w_{2(j)}.\end{aligned}$$

因此,对数单位模型的估计可以通过计算对数线性模型的估计得到.

注意:在计算对数线性模型估计时,对数线性模型中一定要有含所有说明变量的交互项,如这里的 u_{12} 项,这样才能使得说明变量边缘表的估计与观测频数相等,起到说明变量边缘表频数为固定的作用.

对于响应变量 C 为 K 值的情况,有如下几种常用的对数单位函数.

(1) 以 $C = K$ 为基准的对数单位函数

$$\ln\left(\frac{m_{ijk}}{m_{ijK}}\right).$$

SAS 系统将这种函数作为标准的响应函数.

(2) 邻接对数单位函数

$$\ln\left(\frac{m_{ijk}}{m_{ij(k+1)}}\right).$$

(3) 累积对数单位函数

$$\ln\left(\frac{\sum_{l>k} m_{ijl}}{\sum_{l\leq k} m_{ijl}}\right).$$

10　有序离散型变量

前面两章介绍了名义变量的对数线性模型和对数单位模型,名义变量的各水平之间没有大小顺序.如性别、职业、种族等都是名义变量,它们之间没有大小顺序.但是,实际上有些离散变量的水平之间有大小顺序,如职称(高级、中级、初级)、学历(大学、中学、小学)等;另外,还有一些离散化的连续变量,如年龄(20 岁以下、20 岁 ~ 40 岁、40 岁以上)等,称这些离散变量为**有序离散型变量**.名义变量的统计推断方法虽然同样可用于有序变量,但是损失了有关水平之间大小顺序的信息,降低了统计推断的效率.本节仅以两变量为例,介绍有序变量的相关测度、对数线性模型和对数单位模型.

10.1　有序变量的相关测度

一般常采用度量变量间线性关系的相关系数作为两个连续变量间的相关强度的度量.有序变量没有确定的度量尺度,所以,线性相关并不适用于度量有序变量的相关强度,有序变量的相关强度应该采用单调性来度量.

令两个有序随机变量 A 和 B 分别有 I 个和 J 个有序水平，它们的水平分别由小到大排序．当一对个体中一个体的变量 A 和变量 B 的值都大于另一个体的 A 和 B 的值时，称这两个体组成的对是协调的；当一对个体中一个体的 A 的值大于另一个体的 A 的值，但是同时其 B 的值却小于另一个体的 B 的值时，称这两个体组成的对是不协调的；当一对个体中两个体的 A 值相等且 B 值也相等时，称这两个体组成的对是平手的．协调对的个数

$$n_c = \sum_{i=1}^{I-1} \sum_{j=1}^{J-1} n_{ij} \Big(\sum_{k>i} \sum_{l>j} n_{kl} \Big),$$

不协调对的个数

$$n_d = \sum_{i=1}^{I-1} \sum_{j=2}^{J} n_{ij} \Big(\sum_{k>i} \sum_{l<j} n_{kl} \Big).$$

对于一个观测个体对，协调对的概率

$$P_c = 2 \sum_{i=1}^{I-1} \sum_{j=1}^{J-1} p_{ij} \Big(\sum_{k>i} \sum_{l>j} p_{kl} \Big),$$

不协调对的概率

$$P_d = 2 \sum_{i=1}^{I-1} \sum_{j=2}^{J} p_{ij} \Big(\sum_{k>i} \sum_{l<j} p_{kl} \Big).$$

有序变量的几种相关测度都是利用概率差 $P_c - P_d$ 来定义的．下面介绍几种相关测度．

10.1.1 γ 测度

假如没有平手对，且 $\frac{P_c}{P_c + P_d}$ 是协调概率，$\frac{P_d}{P_c + P_d}$ 是不协调概率，则它们的差

$$\gamma = \frac{P_c - P_d}{P_c + P_d},$$

其样本估计为

$$\hat{\gamma} = \frac{n_c - n_d}{n_c + n_d}.$$

γ 的取值范围为 $-1 \leqslant \gamma \leqslant 1$．由独立性可得出 $\gamma = 0$，但是其逆不成立．由单调性可得到 $|\gamma| = 1$，但不一定严格单调．比如，个体 1 的 A 值比个体 2 的 A 值大，但他们的 B 值相等．γ 的样本估计忽略了所有平手个体的对．

10.1.2 d 测度

类似于 γ，d 考虑了变量 A 平手的修正：

$$d(B \mid A) = \frac{(P_c - P_d)}{(1 - \sum_i p_{i+}^2)},$$

其样本估计为

$$\hat{d}(B \mid A) = \frac{2(n_c - n_d)}{(n_{++}^2 - \sum_i n_{i+}^2)}.$$

d 不是一个对称的测度，它将行变量 A 作为独立变量，而将列变量 B 作为响应变量对待．

10.1.3 τ_b 测度

类似于 γ，τ_b 考虑了平手对的修正：

$$\tau_b = \frac{(P_c - P_d)}{\sqrt{(1 - \sum_i p_{i+}^2)(1 - \sum_j p_{+j}^2)}},$$

其样本估计为

$$\hat{\tau}_b = \frac{2(n_c - n_d)}{\sqrt{(n_{++}^2 - \sum_i n_{i+}^2)(n_{++}^2 - \sum_j n_{+j}^2)}}.$$

10.2 有序变量的对数线性模型

有序变量的对数线性模型描述多个有序响应变量之间相互关联的交互作用．令两个有序变量 A 和 B 分别有 I 个和 J 个有序水平，为了反映水平的大小顺序，将它们的水平分别评分为 $u_1 \leqslant u_2 \leqslant \cdots \leqslant u_I$ 和 $v_1 \leqslant v_2 \leqslant \cdots \leqslant v_J$．有序变量的对数线性模型为

$$\ln m_{ij} = \lambda + \lambda_i^A + \lambda_j^B + \beta u_i v_j,$$

其中参数 $\sum_i \lambda_i^A = \sum_j \lambda_j^B = 0$．该模型仅用一个参数 β 描述变量 A 与 B 的相互关联程度．当 $\beta = 0$ 时，变量 A 与 B 相互独立．对于水平评分，有下面几种简单的评分方法．

(1) 单位评分　对于所有的 i，$u_i = i$；对于所有的 j，$v_j = j$．

(2) 等距评分　对于所有的 i，$u_i - u_{i-1} = C_A$；对于所有的 j，$v_j - v_{j-1} = C_B$．其中，C_A 和 C_B 为正常数．

(3) 零和评分　$\sum_i u_i = \sum_j v_j = 0$．例如，$u_i = i - (I+1)/2$，$v_j = j - (J+1)/2$．

可以用比值比对 β 进行解释．对于任意的两行 $h < i$ 和任意的两列 $j < k$，

$$\ln \frac{m_{hj} m_{ik}}{m_{hk} m_{ij}} = \beta(u_i - u_h)(v_k - v_j).$$

可以将 β 解释为变量 A 和变量 B 的每单位距离上的对数比值比，即 $u_i - u_h = v_k - v_j = 1$ 时，$\beta = \ln[m_{hj} m_{ik} / (m_{hk} m_{ij})]$．

令局部比值比

$$\mathrm{OR}_{ij} = \frac{m_{ij} m_{i+1,j+1}}{m_{i,j+1} m_{i+1,j}},$$

可得

$$\ln \mathrm{OR}_{ij} = \beta(u_{i+1} - u_i)(v_{j+1} - v_j).$$

当 v_j 采用等距评分时，所有的局部比值比都是相等的．

10.3 有序变量的对数单位模型

有序变量的对数单位模型描述有序说明变量对有序响应变量的作用．令 B 为响应变量，A 为说明变量，$p_{j|i} = P(B = j \mid A = i)$ 表示给定 $A = i$ 时 $B = j$ 的条件概率．有序变量的对数单位模型为

$$\ln\left(\frac{p_{j+1|i}}{p_{j|i}}\right) = \ln\left(\frac{m_{i,j+1}}{m_{ij}}\right) = (\lambda_{j+1}^B - \lambda_j^B) + \beta(v_{j+1} - v_j)u_i.$$

当 v_j 采用单位评分时，该模型简化为

$$\ln\left(\frac{p_{j+1|i}}{p_{j|i}}\right) = \alpha_j + \beta u_i,$$

其中 $\alpha_j = \lambda_{j+1}^B - \lambda_j^B$.

下面是常用的对数单位变换．

(1) 以 $Y = J$ 为基准的对数单位变换

$$\ln\left(\frac{p_{j|i}}{p_{J|i}}\right).$$

SAS 系统将这种变换作为标准的响应函数．

(2) 累积对数单位变换

$$\ln\left(\frac{\sum_{k>j} p_{k|i}}{\sum_{k\leq j} p_{k|i}}\right).$$

11 逻辑斯谛回归模型

前面几章的内容是关于离散变量间相互关联的统计推断．本节讨论一个二值响应变量和若干个说明变量的逻辑斯谛(logistic)回归模型．其中，说明变量可以是离散型的，也可以是连续型的．**逻辑斯谛回归模型**描述了一条 S 形状的回归曲线，如图 11-1 所示．该 S 形曲线被应用在很多实际问题中．例如，年龄与高血压患病率之间的关系，随着年龄的增大，高血压患病率单调上升；但是年轻时，如 45 岁以下，年龄的增加对患病率有较小的影响；到某个中年的年龄段，如 45 岁至 65 岁之间，年龄的增加，对患病率有较大的影响；到了老年，如 65 岁以上，年龄的增长对患病率的影响又变得小了．

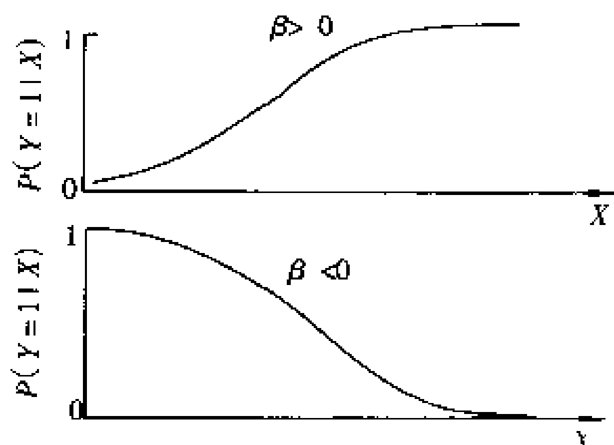


图 11-1

11.1 逻辑斯谛回归模型

11.1.1 逻辑斯谛回归模型

令 Y 为二值响应变量，取值0或1；$\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \cdots, X_p)$ 为 p 维说明变量的向量；$P(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$ 为给定 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}$ 下，$Y = 1$ 的条件概率．下面的方程描述了向量 $\boldsymbol{X}$ 中的一个变量变化时，条件概率 $P(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$ 呈 S 形曲线变化：

$$P(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \frac{\exp(\alpha + \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})}{1 + \exp(\alpha + \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})},$$

其中 $\boldsymbol{\beta}$ 是 p 维参数向量；$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}$ 表示 $\boldsymbol{\beta}$ 的转置．将上式进行对数优比变换(即对数单位变换)，得

$$\ln\left(\frac{P(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})}{1 - P(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})}\right) = \alpha + \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}.$$

11.1.2 参数的解释

令 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_p)^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{x}^* = (x_1^*, x_2^*, \cdots, x_p^*)^{\mathrm{T}}$．定义 $\boldsymbol{x}^*$ 对 $\boldsymbol{x}$ 比值比为

$$\mathrm{OR}(\boldsymbol{x}^* : \boldsymbol{x}) = \frac{P(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}^*)P(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})}{P(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}^*)P(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})}.$$

由逻辑斯谛回归模型，可得

$$\mathrm{OR}(\boldsymbol{x}^* : \boldsymbol{x}) = \exp[\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x})].$$

如果仅 $x_i^* \neq x_i$，而对于其他所有 $j \neq i$，$x_j^* = x_j$，那么，

$$\mathrm{OR}(\boldsymbol{x}^* : \boldsymbol{x}) = OR(x_i^* : x_i) = \exp[\beta_i(x_i^* - x_i)].$$

进一步，当 $x_i^* - x_i = 1$ 时，

$$\mathrm{OR}(x_i + 1 : x_i) = \exp(\beta_i),$$

$$\beta_i = \ln\mathrm{OR}(x_i + 1 : x_i).$$

因此,β_i 可解释为 X_i 单位变化的对数比值比．

注意:逻辑斯谛回归模型假定了 X_i 单位变化的对数比值比为 β_i,且 β_i 不随 x_i 值的大小而发生变化．

一般地,对于所有的 $\boldsymbol{x}^*$ 和 $\boldsymbol{x}$,可得到

$$\mathrm{OR}(\boldsymbol{x}^*:\boldsymbol{x}) = \prod_{i=1}^{p}\mathrm{OR}(x_i^*:x_i).$$

因此,逻辑斯谛回归模型假定了变量 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 之间无乘法交互,即多个变量的联合效应等于各个变量效应的乘积．如果需要研究变量间交互的话,比如 x_i 与 x_j 的交互,可以在逻辑斯谛回归模型中增加一项 $\beta_{ij}(x_ix_j)$.

11.2 经验逻辑斯谛回归模型

本节介绍一种经验分布的方法,可用于初步确定逻辑斯谛回归模型是否合适,也可用于计算参数最大似然估计迭代算法的初始值．将样本按 $\boldsymbol{X}$ 的取值分为 I 个组,使得每组都取相同的 $\boldsymbol{X}$ 值．设第 i 组有 n_i 个观测个体,其中 y_i 个观测个体的响应值 $Y=1$. $y_i,i=1,2,\cdots,I$,是独立的二项随机变量．称

$$z_i = \ln\left(\frac{y_i}{n_i-y_i}\right)$$

为经验对数单位．当 $y_i=0$ 或 $n_i=0$ 时,上式无定义,因此,采用修正的经验对数单位．

$$z_i^* = \ln\left(\frac{y_i+0.5}{n_i-y_i+0.5)}\right).$$

当 $\boldsymbol{X}$ 是连续型变量时,计算经验对数单位前,需要将观测数据分组．

令

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

其中 $\boldsymbol{Z}=(z_1,z_2,\cdots,z_I)^{\mathrm{T}}$;$\boldsymbol{\beta}=(\alpha,\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_p)^{\mathrm{T}}$;$\boldsymbol{\varepsilon}=(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_I)^{\mathrm{T}}$ 为随机误差,$E(\varepsilon_i)=0,\mathrm{var}(\varepsilon_i)=v_i$,且 $\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_I$ 相互独立;

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{I1} & \cdots & x_{Ip} \end{bmatrix},$$

$(x_{i1},x_{i2},\cdots,x_{ip})$ 为第 i 组的说明向量 $\boldsymbol{X}$ 取值．$\boldsymbol{Z}$ 的渐近协方差距阵的估计为

$$\widehat{\mathrm{var}}(\boldsymbol{Z}) = \boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} v_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & v_I \end{bmatrix},$$

其中 $v_i=(y_i(1-y_i/n_i))^{-1}$.因此,$\boldsymbol{\beta}$ 的加权最小二乘估计

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{Z}.$$

11.3 参数的最大似然估计

$y_1, y_2, \cdots, y_I$ 相互独立，且服从二项分布，所以似然函数

$$L(\boldsymbol{\beta}) = \prod_{i=1}^{I} P(Y = 1 \mid X = \boldsymbol{x}_i)^{y_i}(1 - P(Y = 1 \mid X = \boldsymbol{x}_i))^{n_i - y_i},$$

其中 $\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip})$ 为第 i 组的 X 值．由

$$1 - P(Y = 1 \mid X = \boldsymbol{x}) = \frac{1}{1 + \exp(\alpha + \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})},$$

可得对数似然函数

$$l(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{j=0}^{p}\Big(\sum_{i=1}^{I} y_i x_{ij}\Big)\beta_j - \sum_{i=1}^{I} n_i \ln\Big(1 + \exp\Big(\sum_{j=0}^{p}\beta_j x_{ij}\Big)\Big),$$

其中 β_0 定义为 α，$x_{i0} = 1$．因为

$$\frac{\partial l(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_a} = \sum_{i=1}^{I} y_i x_{ia} - \sum_{i=1}^{I} n_i x_{ia}\left(\frac{\exp\Big(\sum_{j=0}^{p}\beta_j x_{ij}\Big)}{1 + \exp\Big(\sum_{j=0}^{p}\beta_j x_{ij}\Big)}\right),$$

所以，似然方程为

$$\sum_{i=1}^{I} y_i x_{ia} - \sum_{i=1}^{I} n_i x_{ia}\widehat{p}_i = 0 \qquad (a = 0, 1, 2, \cdots, p),$$

其中 $P(Y = 1 \mid X = \boldsymbol{x}_i)$ 的最大似然估计

$$\widehat{p}_i = \frac{\exp\Big(\sum_{j=0}^{p}\widehat{\beta}_j x_{ij}\Big)}{1 + \exp\Big(\sum_{j=0}^{p}\widehat{\beta}_j x_{ij}\Big)}.$$

参数向量 $\boldsymbol{\beta}$ 的最大似然估计需要使用费希尔-得分(Fisher-scoring)方法或牛顿-拉菲逊(Newton-Raphson)方法等迭代算法计算．很多统计软件系统，如 SAS 系统，提供了有关算法．这里，仅介绍计算最大似然估计 $\boldsymbol{\beta}$ 的迭代加权最小二乘法．

第一步：置初始值．令 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)}$ 等于加权最小二乘估计 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$，或其他初始值．令 $t = 0$.

第二步：计算概率和协方差估计．

$$\widehat{p}_i^{(t)} = \frac{\exp\Big(\sum_{j=0}^{p}\widehat{\beta}_j^{(t)} x_{ij}\Big)}{\Big(1 + \exp\Big(\sum_{j=0}^{p}\widehat{\beta}_j^{(t)} x_{ij}\Big)\Big)},$$

$$v_i^{(t)} = (n_i\widehat{p}_i^{(t)}(1 - \widehat{p}_i^{(t)}))^{-1}.$$

第三步：计算参数估计．令

$$z_i^{(t)} = \ln \frac{\widehat{p}_i^{(t)}}{1-\widehat{p}_i^{(t)}} + \frac{y_i - n_i\widehat{p}_i^{(t)}}{n_i\widehat{p}_i^{(t)}(1-\widehat{p}_i^{(t)})},$$

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(t+1)} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{(t)^{-1}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{(t)^{-1}}\boldsymbol{Z}^{(t)},$$

其中
$$\boldsymbol{Z}^{(t)} = (z_1^{(t)}, z_2^{(t)}, \cdots, z_I^{(t)})^{\mathrm{T}}.$$

重复第二、第三步，迭代直至估计值收敛为止．

11.4 参数的假设检验

检验逻辑斯谛回归模型中的参数可采用对数似然比检验．设零假设为 $H_0:\beta_i = 0$，对立假设为 $H_1:\beta_i \neq 0$．统计量为

$$G^2 = -2(l_1 - l_0),$$

其中 l_j 为在 H_j 下的最大对数似然函数．在 H_0 成立下，统计量 G^2 渐近服从自由度为 1 的卡方分布．

参 考 文 献

1 张尧庭，方开泰．多元统计分析引论．北京：科学出版社，1982．

2 陈希孺，王松桂．近代实用回归分析．南宁：广西人民出版社，1984．

3 韦博成，鲁国斌，史建清．统计诊断引论．南京：东南大学出版社，1991．

4 Anderson T W. An introduction to multivariate statistical analysis. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1984.

5 Garthwaite P H. An interpretation of partial least squares. JASA, 1994 (1): 122

6 Agresti A. Analysis of ordinal categorical data. New York: John Wiley, 1984.

7 Agresti A. Categorical data analysis. New York: John Wiley, 1990.

8 Armitage P, Colton T. Encyclopedia of biostatistics. New York: John Wiley, 1998.

9 （美）Bishop Y M M, Fienberg S E, Holland P W. 离散多元分析：理论与实践．张尧庭译．北京：中国统计出版社，1998.

10 Cox D R, Wermuth N. Multivariate dependencies: models, analysis and interpretation. London: Chapman & Hall, 1996.

11 Edwards D. Introduction to graphical Modelling. New York: Springer-Verlag, 1995.

12 Fienberg S E. The analysis of cross-classified categorical data. 2nd ed. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, 1980.

13 Freedman D, Pisani R, Purves R, et al. Statistics. 2ed. New York: W W Norton & Company, Inc., 1991.

14 Lauritzen S L. Graphical models. Oxford: Oxford University Press, 1996.

15 Plackett R L. The analysis of categorical data. 2nd ed. London: Charles Griffin & Company Ltd, 1981.

16 Santner T J. The statistical analysis of discrete data. New York: Springer-Verlag, 1989.

17 Whittaker J. Graphical models in applied multivariate statistics. New York: John Wiley, 1990.
18 柳川堯,離散多変量データの解析．東京:共立出版株式会社,1986.
19 高惠旋等．SAS系统:SAS/STAT软件使用手册．北京:中国统计出版社,1997.
20 郭祖超．医用数理统计方法．第三版．北京:人民卫生出版社,1988.
21 金丕焕．医用统计方法．上海:上海医科大学出版社,1995.
22 孙尚拱．实用多变量统计方法与计算程序．北京:北京医科大学与中国协和医科大学联合出版社,1990.
23 张尧庭等．定性资料的统计分析．桂林:广西师范大学出版社,1991.

·随机数学卷·

第 8 篇

贝叶斯统计

编　者　张尧庭
审校者　陶　波

目　　录

引 言

贝叶斯统计源于英国学者贝叶斯(R.T.Bayes)撰写的一篇具有哲学性的论文:An Essay Towards Solving a Problem in the Doctrine of Chances(这篇论文已译成中文,见参考文献[1]的附录4).后来的学者在此基础上发展了一整套的统计推断的原理和方法,这就是贝叶斯统计.一些学者更是极力主张把贝叶斯的方法作为全部统计推断的合理基础,这些学者所形成的学派称之为贝叶斯学派.贝叶斯学派的形成经历了很长的时间,对于贝叶斯学派的形成有重要贡献的数学家,按时间先后顺序有德·芬尼逖(B.De Finetti)、杰弗莱(H.Jeffreys)、古特(I. Good)、萨凡奇(L.Savage)和林德莱(D.Lindley).

1958年英国历史最长的统计杂志 Biometrika 全文重刊贝叶斯的论文(注意,与第一次刊印此文的1763年几乎相隔200年),表明贝叶斯学派已成为一支不可忽视的队伍.贝叶斯学派的工作对决策理论的发展是明显的,对经典学派的理论和方法也提供了种种有益的思路,出现了相互批评又相互支持、共同发展的局面.

经验贝叶斯方法是20世纪50年代由罗宾斯(H.Robbins)提出的,他把经典学派和贝叶斯学派的方法融于一体,形成了经验贝叶斯(empirical Bayes)方法,简称为EB方法.

贝叶斯统计获得了广泛的应用.贝叶斯学派已经成为统计学中一个有广泛影响的学派,它的一些思想已渗入到社会科学的不少领域,并产生了新的分支.

1 贝叶斯公式与贝叶斯学派

1.1 贝叶斯公式

贝叶斯公式有几种形式,通常用事件形式或随机变量形式表示.

事件形式 设 $A_1,A_2,\cdots,A_n$ 互不相容,并且有 $\bigcup\limits_{i=1}^{n}A_i=\Omega$(必然事件),则对于任一事件 B,有

$$P(A_i\mid B)=\frac{P(A_i)P(B\mid A_i)}{\sum\limits_{j=1}^{n}P(A_j)P(B\mid A_j)}\qquad(i=1,2,\cdots,n).\tag{1-1}$$

随机变量形式 设 x,y 为两个随机变量,$p(x\mid y)$ 是 x 对 y 的条件密度,$q(y)$ 是 y 的边缘密度,于是 y 对 x 的条件密度

$$h(y \mid x)=\frac{q(y)p(x \mid y)}{\int q(y)p(x \mid y)\mathrm{d}y}. \tag{1-2}$$

在统计中,常用的是式(1-2). 下面用贝叶斯论文中讨论的问题来说明这一公式的意义.

设事件 A 发生的概率是 θ,在 n 次独立试验中,A 发生 a 次的概率是二项分布

$$p(a \mid \theta)=\binom{n}{a}\theta^{a}(1-\theta)^{n-a},$$

而现在对 θ 一无所知,它取(0,1)区间内的任一值都有可能,那么 θ 在区间 $[f,g]$ $(0\leqslant f\leqslant g\leqslant 1)$ 之内的"机会"是多少呢?

把"机会"理解成概率,用(0,1)上的均匀分布描述 θ 取值的密度,于是式(1-2)的 $h(\theta \mid a)$ 就是观察到发生次数 a 之后 θ 的密度. 这样,$f\leqslant\theta\leqslant g$ 的概率(机会)就是 $h(\theta \mid a)$ 在 $[f,g]$ 上的积分:

$$\int_f^g h(\theta \mid a)\mathrm{d}\theta=\frac{\int_f^g \theta^{a}(1-\theta)^{n-a}\mathrm{d}\theta}{\int_0^1 \theta^{a}(1-\theta)^{n-a}\mathrm{d}\theta}.$$

贝叶斯的结论正是如此.

这里明显地把参数 θ 也看成是有分布的一种随机变量,用条件概率来看待 $p(a \mid \theta)$ 和 $h(\theta \mid a)$,应用贝叶斯公式式(1-2)就求出了解答.

实际上,统计问题本身就是寻求一种方式. 怎样从样本提供的信息来调整人们对参数原有的认识,贝叶斯的论文给出了处理这一类问题的一个范式,它的基础是条件概率公式

$$p(A \mid B)=\frac{P(AB)}{P(B)}.$$

怎样理解这一公式的含义,是经典学派与贝叶斯学派的分歧点,它归结为对概率概念的理解,这一点将在1.4节中讨论.

1.2 贝叶斯假设

从上面的讨论可看出,应用贝叶斯公式时,需要知道参数 θ 的分布——**先验分布**,然后才能导出 $h(\theta \mid a)$——**后验分布**. 贝叶斯认为,当人们对参数 θ 没有任何信息时,θ 在它允许变化的范围内机会是一样的,也就是认为 θ 的先验分布应是它在值域上的均匀分布. 这一想法提升为一般性的原则,就称为**贝叶斯假设**.

对于贝叶斯假设,争议较多. 首先是均匀分布的存在性. 在一个有限区域内,均匀分布是存在的,但在一个无限区域内,均匀分布就不存在了. 其次,贝叶斯假设是为了处理没有任何先验信息时的假设,既然是无信息,又何来先验分布呢?所以**无信息先验分布**就成了贝叶斯学派的一个难题. 下一节和下一章将更多地来论述这一问题.

但贝叶斯假设确有其合理性,在一些问题中,由它导出的解更易为人们所接

受．下面用实例来说明．

设将一枚硬币掷 n 次，正面向上出现了 r 次，但不知道这枚硬币是否均匀（这等同于不知某一事件发生的概率），那么，这枚硬币正面向上的概率 θ 是多少？通常都是用频率 r/n 来估计概率 θ，这一估计有种种优良性质，然而当 r 在 0 或 n 附近时，给出的估计就接近0或1，这是难以接受的．例如一种导弹发射了5次，5次都成功了，另一种导弹，发射了 3 次，3 次也都成功了，这两种导弹发射成功的概率都认为是1，这就不易接受．人们对5次成功的信念显见比3次成功的要大，但也不能认为成功的概率就是 1. 如果用贝叶斯假设，采用 θ 的后验期望作为参数θ的统计，就可导出概率 θ 的估计量

$$\hat{\theta}=\frac{r+1}{n+2},$$

于是会有如下结果：

若5次试验、5次成功，则 $\hat{\theta}=\frac{6}{7}$，

若3次试验、3次成功，则 $\hat{\theta}=\frac{4}{5}$，

这样就明显地给出了差别，而且永远不会是1. 这个例子说明了贝叶斯假设的合理性．正是因为有了一些成功的实例，人们才认真对待贝叶斯假设，这就推动了贝叶斯学派的发展．

1.3 贝叶斯学派的形成

贝叶斯学派的形成是在 20 世纪．人们认识到客观的概率——频率的稳定值与主观概率——人的信念之间既有共性又有区别．20世纪数学的公理化倾向影响到了统计界，对概率的公理化经过了许多人的努力，最终由科尔莫戈罗夫(A.N.Kolmogorov)完成，并得到了普遍的认同：把概率看成正则化的测度．然而，对主观概率应该用什么样的公理来描述，经过了很长时间的讨论，还没有比较一致的看法．德·芬尼逖认为从科尔莫戈罗夫公理中可得出互斥事件之和的概率是各事件概率之和的结论，对于信念而言是不成立的，只能是有限可加性：有限个互斥事件之和的概率是各事件的概率之和．他的关于可换随机变量的研究成果为先验分布的客观性提供了某种基础．费希尔(R.A.Fisher)的似然推理促进了贝叶斯学派的成长．似然函数是贝叶斯学派的基点和支柱，从最大似然估计到最大后验估计，从似然比到后验优比，等等，使贝叶斯的估计、推断方法和理论被系统化了．杰弗莱在无信息先验分布上的重要突破，则形成了后来称为杰弗莱准则的方法（具体内容见2.1节），杰弗莱写了一本《概率论》（见文献[2]），这本书的出版标志着贝叶斯学派的形成．后来，古特对主观概率的研究，萨凡奇对效用函数、主观概率以及它们之间存在的深刻联系的研究，是很有成效的工作，被公认为是把贝叶斯学派推进到了一个新的阶段．林德莱也做了不少工作，把一些经典学派的成果给出了贝叶斯学派的推导和解释，他写了很多书和论文，十分明确而尖锐地捍卫了贝叶斯学派．由于贝叶斯方法在实际工作中的明显的成功，又由于经典学派的一些工作从

理论上也要借助于贝叶斯方法才能论证优良性，如序贯分析，因此，贝叶斯学派的队伍日益壮大起来．尽管统计学中有不少学派，但无疑地，经典学派和贝叶斯学派是两大主要的学派．

1.4 贝叶斯学派与经典学派的比较

经典学派也称为频率学派、抽样学派，由皮尔逊(K. Pearson)等人在20世纪初开创，经费希尔、奈曼(J. Neyman)等人的努力，在20世纪40年代形成系统的理论．目前各国出版的统计教材中，这一部分往往占有主要的篇幅．实践证明经典学派的理论和方法是有意义的，它指导人们在许多领域取得了重要的成果．但这并不意味着它是独一无二的、完全正确的、对任何问题都能适用的．下面举例说明贝叶斯学派和经典学派的比较，从中可以看出各自的特点和问题．

设 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 独立同分布 $N(\theta, \sigma^2)$，取均值

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_n}{n},$$

于是 $\bar{x}$ 的分布是 $N(\theta, \sigma^2/n)$．当 σ^2 已知时，可以给出 θ 的区间估计，即有

$$P(|\bar{x} - \theta| \leqslant \frac{u_{\alpha/2}\sigma}{\sqrt{n}}) = 1 - \alpha, \tag{1-3}$$

其中 $0 < \alpha < 1$，$u_{\alpha/2}$ 是 $N(0,1)$ 的上 α 分位数．

对于式(1-3)，两派有各自的解释．贝叶斯学派认为，这表明参数 θ 落在$[\bar{x} - \frac{u_{\alpha/2}\sigma}{\sqrt{n}}, \bar{x} + \frac{u_{\alpha/2}\sigma}{\sqrt{n}}]$的可能性为 $1-\alpha$；经典学派认为 θ 不是随机变量，不能谈 θ 落在某一区间的概率，只能谈区间$[\bar{x} - \frac{u_{\alpha/2}\sigma}{\sqrt{n}}, \bar{x} + \frac{u_{\alpha/2}\sigma}{\sqrt{n}}]$盖住真实 θ 的概率是 $1-\alpha$．

经典学派坚持，概率只能理解为频率的稳定值，因此难以确定参数 θ 的先验分布；贝叶斯学派认为概率可以反映人们的信念，人们的信念是由概率转化而来的．经典学派认为不存在无信息先验分布，只存在样本给出的统计量所具有的抽样分布，所以经典学派又称为频率学派或抽样学派．贝叶斯学派认为，可以从无信息先验分布的贝叶斯假设导出式(1-3)，就说明虽然经典学派不承认有先验分布，但实际上却是用了无信息先验分布．

有关两学派的种种争论不可能在这里详细介绍，但需要特别指出的是，这些争论使双方都努力于解决各自存在的问题，大大地推动了学术上的进展，生动地体现了学科内部的学术讨论是推动学科发展的动力．20世纪80年代中一系列的研究成果充分说明了这一点．

2 贝叶斯统计分析

2.1 先验分布的判定

2.1.1 记号和术语

用 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 表示样本,有时也表示样本值;用希腊字母 $\theta,\mu,\sigma^2,\lambda,\cdots$ 表示参数;用 $\pi(\theta)$ 表示 θ 的先验分布密度,$p(x_1,x_2,\cdots,x_n \mid \theta)$ 表示样本对 θ 的条件密度,$h(\theta \mid x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 表示 θ 对样本的条件密度,也就是 θ 的后验密度;用 $\int f(x)\mathrm{d}x$(不写积分区域)表示在全域上积分,即

$$\int f(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\mathrm{d}x;$$

用"$\propto$"表示左右两端只差一个常数因子,$A \propto B$ 表示存在常数k使$A = kB$,这样在书写分布密度时可以略去与变量无关的常数,如正态 $N(a,\sigma^2)$ 的密度可写为

$$p(x) \propto \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right),$$

上式右端称为密度 $N(a,\sigma^2)$ 的核.

有了这些记号和规定后,若给定样本密度为 $p(x \mid \theta)$,先验分布为 $\pi(\theta)$,则贝叶斯公式可表示为

$$h(\theta \mid x) = \frac{\pi(\theta)p(x \mid \theta)}{\int \pi(\theta)p(x \mid \theta)\mathrm{d}\theta} \propto \pi(\theta)p(x \mid \theta). \tag{2-1}$$

2.1.2 贝叶斯假设

决定先验分布的一种方式是采用贝叶斯假设. 下面以正态分布为例说明这一点. 设 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 是 $N(\theta,1)$ 的样本,于是均值

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \sim N\left(\theta,\frac{1}{n}\right).$$

考虑到 θ 可能取$(-\infty,\infty)$上的任何值,因此可采用贝叶斯假设

$$\pi(\theta) \propto 1$$

作为先验分布. 根据式(2-1),有

$$h(\theta \mid \bar{x}) \propto p(x \mid \theta) \propto \exp\{-(\bar{x}-\theta)^2/(2/n)\}, \tag{2-2}$$

即 $h(\theta \mid \bar{x})$ 是 $N(\bar{x},1/n)$ 的密度. 从这个结论可以得到式(1-3).

尽管 $\pi(\theta) \propto 1$ 不是一个密度,但由它导出的后验分布式(2-2)却是一个密度,因此人们感到需要引入广义密度的概念. 若

$$f(x) \geqslant 0, \quad \int f(x)\mathrm{d}x = \infty,$$

则称 $f(x)$ 为**广义密度**．由此可知，贝叶斯假设自然引出了广义密度．贝叶斯假设是与无信息先验相联系的，所以下面先讨论无信息先验分布的判定方法，然后再谈有先验信息时先验分布的判定方法．

2.1.3 杰弗莱准则

贝叶斯假设中隐含着一个矛盾：如果 θ 用均匀分布，则将参数换成 θ 的单调函数 $g(\theta)$ 时，由于问题是不变的，因此按贝叶斯假设，$g(\theta)$ 也应该用均匀分布，这就导致了不协调，因为 θ 是均匀分布时，$g(\theta)$ 一般不再是均匀分布，反之亦然．

杰弗莱为了克服这一矛盾，提出了下述准则：先验分布密度 $\pi(\theta)$ 应满足

$$\pi(\theta) \propto (\det \boldsymbol{I}(\theta))^{1/2}, \tag{2-3}$$

其中 $\boldsymbol{I}(\theta)$ 是费希尔信息矩阵，它是非负定的；记号 det 表示其后矩阵的行列式．如果 θ 是 p 维向量，则 $\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta})$ 是 $p \times p$ 矩阵，其(i,j)元素为

$$I_{ij}(\boldsymbol{\theta}) = -E_{\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\ln p(x \mid \theta)\right). \tag{2-4}$$

当参数 $\boldsymbol{\theta}$ 变换为 $\boldsymbol{\eta} = \eta(\boldsymbol{\theta})$ 时，则相应于 $\boldsymbol{\eta}$ 的信息矩阵为

$$\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\eta}) = \left[\frac{\partial\theta_i}{\partial\eta_j}\right]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta})\left[\frac{\partial\theta_i}{\partial\eta_j}\right],$$

其中$[a_{ij}]$是以 a_{ij} 为(i,j)元素的 $p \times p$ 矩阵；$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的转置．这里假定所涉及的所有逆函数和导数都存在．于是，如果用 $|a_{ij}|$ 记矩阵$[a_{ij}]$的行列式的绝对值，则有

$$(\det \boldsymbol{I}(\boldsymbol{\eta}))^{1/2} = \left|\frac{\partial\theta_i}{\partial\eta_j}\right|(\det \boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}))^{1/2}.$$

上式意味着若用$(\det \boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}))^{1/2}$作为 $\boldsymbol{\theta}$ 的先验密度的核，则通过变换 $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{\theta})$ 后，新参数 $\boldsymbol{\eta}$ 的先验密度的核正好是$(\det \boldsymbol{I}(\boldsymbol{\eta}))^{1/2}$．这样，杰弗莱准则就解决了贝叶斯假设中所隐含的矛盾．

就正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$ 而言，使用杰弗莱准则，可得 $N(\mu,\sigma^2)$ 的似然函数

$$L(\mu,\sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right).$$

不难算出

$$\frac{\partial \ln L}{\partial\mu} = \frac{x-\mu}{\sigma^2}, \quad \frac{\partial \ln L}{\partial\sigma} = -\frac{1}{\sigma} + \frac{(x-\mu)^2}{\sigma^3},$$

$$\frac{\partial^2 \ln L}{\partial\mu^2} = -\frac{1}{\sigma^2}, \quad \frac{\partial^2 \ln L}{\partial\mu\partial\sigma} = -\frac{2(x-\mu)}{\sigma^3},$$

$$\frac{\partial^2 \ln L}{\partial\sigma^2} = \frac{1}{\sigma^2} - \frac{3(x-\mu)^2}{\sigma^4}.$$

于是，对于参数的不同情况，可分别根据杰弗莱准则得到先验密度：

当 σ 已知时，$\pi_1(\mu) \propto 1, \quad \mu \in (-\infty,\infty)$；

当 μ 已知时，$\pi_2(\sigma) \propto 1/\sigma,\quad \sigma \in (0,\infty)$；

当 μ,σ 均未知时，因为

$$I(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma^2} & 0 \\ 0 & \frac{2}{\sigma^2} \end{bmatrix},$$

故

$$\pi_3(\mu,\sigma) \propto 1/\sigma^2,\quad \mu \in (-\infty,\infty), \sigma \in (0,\infty).$$

通常假定 μ 与 σ 独立，因而 (μ,σ) 的先验分布密度也可定义为：

$$\pi_4(\mu,\sigma) = \pi_1(\mu)\pi_2(\sigma) \propto \frac{1}{\sigma},\quad \mu \in (-\infty,\infty), \sigma \in (0,\infty).$$

2.1.4 其他无信息先验分布的判定准则

无信息先验分布的判定，可以从不同的观点去看待贝叶斯假设．除了使用杰弗莱准则外，从信息论的角度来看，无信息意味着不确定性最大，而熵是度量不确定性的，因此先验分布应具有最大熵才能是无信息的．

熵的定义是：当 $x \sim p(x)$ 时，

$$-\int p(x)\ln p(x)\mathrm{d}x \quad \text{或} \quad -\sum_i p_i \ln p_i (x\ \text{离散}).$$

在 (a,b) 区间上，当 $-\infty < a < b < \infty$ 时，熵最大的分布是均匀分布，因此无信息先验分布采用最大熵的分布是贝叶斯假设的自然推广，最大熵准则就成了确定先验分布的一个重要的工具，它在时间序列分析和其他分支中都有很好的应用．最大熵准则还适用于有部分的先验信息的情况，尤其是当对先验分布的矩或某些特征有所了解时，用最大熵就能很容易确定先验分布的表达式，这体现在下面的定理中．

定理 1 设随机变量 ξ 对于已知的 $t_i(\xi)$ 和 μ_i 满足关系式

$$Et_i(\xi) = \mu_i \qquad (i = 1,2,\cdots,k),$$

则它的熵最大的密度

$$f(x) = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{k} \lambda_i t_i(x)\right)}{\int \exp\left(\sum_{i=1}^{k} \lambda_i t_i(x)\right)\mathrm{d}x}, \tag{2-5}$$

其中 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k$ 使等式

$$\int t_i(x) f(x)\mathrm{d}x = \mu_i \qquad (i = 1,2,\cdots,k)$$

都成立．

这条定理提供了利用部分先验信息的可能性．例如已知先验分布的矩、分位数、它的已知函数的某些特征，就可以确定相应的先验分布．这条定理的一个有趣的推论是：在 $(-\infty,\infty)$ 上的分布密度，如果已知一、二阶矩，则最大熵的分布一定是正态的．这从定理 1 的 $f(x)$ 表达式就可看出．

对贝叶斯假设的另一种理解是参数 θ 在它的变化范围内,各个点的地位是相同的,具有某种对称性,或者说在某一群的作用下具有不变性,于是与变换群相联系的不变测度就成了自然的先验分布.这一思想在理论上和实用上都是有意义的,但要求对参数的变化范围所在的空间结构有相当深入的了解.解决这一类问题的工具是哈尔(A. Haar)测度.

2.1.5 共轭分布

共轭分布是贝叶斯方法中常用的一种判定先验分布的方法,它的思想基础是先验的规律与后验的规律应具有一致性.这一要求的具体化就是先验分布与后验分布要属于同一类型.更确切地说,设样本 x 对于参数 θ 的条件分布是 $p(x\mid\theta)$,$\mathscr{P}$ 为 θ 的一个分布族.任取 $\pi\in\mathscr{P}$ 作为先验分布,如果对于任意样本 x,后验分布 $h(\theta\mid x)$ 仍在族 $\mathscr{P}$ 内,则称 $\mathscr{P}$ 是 $p(x\mid\theta)$ 的共轭分布族.下面用二项分布作为例子来说明这一点.

在 n 次独立试验中,事件 A 发生的次数为 r,A 发生的概率 θ 是未知参数,于是,r 的分布是二项分布 $\binom{n}{r}\theta^r(1-\theta)^{n-r}$.如果选用贝塔分布 $\beta(a,b)$ 作为先验分布,则后验分布

$$h(\theta\mid x)\propto\pi(\theta)p(x\mid\theta).$$

此处,样本 x 的值就是 r,因此,

$$h(\theta\mid r)\propto\theta^a(1-\theta)^b\binom{n}{r}\theta^r(1-\theta)^{n-r}\propto\theta^{a+r}(1-\theta)^{n+b-r},\qquad(2\text{-}6)$$

也即 $h(\theta\mid r)$ 是贝塔分布 $\beta(a+r,n+b-r)$,与先验分布 $\beta(a,b)$ 属于同一类型,所以 $\beta(a,b)$ 与二项分布是共轭的.

对于共轭分布,每个具体的密度是可以寻找到的,但没有一个一般性的公式.有了共轭分布后难点就转为如何确定共轭分布中的参数.

2.1.6 其他方法

判定先验分布的方法这里无法一一列举.最重要的是具体问题要具体分析.例如工厂生产某种标准件,具有长期积累的数据,则可由这些历史数据估计出先验分布.又如,样本分布的未知参数 θ 取值于实直线的一个有限区间,则可将该区间划分为一些不相交的小区间,然后请专家对 θ 属于各小区间的概率发表看法,根据这些看法做出概率直方图,再由此画出一条平滑的密度曲线,作为对先验密度的估计.

贝叶斯方法的一大优点是利用了先验信息,先验是指进行统计试验之前,后验是指进行统计试验,取得样本,见到了样本值之后.把先验信息和样本信息综合在一起,就是后验分布,所以后验分布可以看成是人们在获得样本信息之后,调整人们先验认识的一个合理的推断.如果没有先验信息可以利用,则贝叶斯方法的长处就难以发挥.在实际工作中,人们总是有先验信息可以利用的,所以贝叶斯方法很受实际工作者的欢迎.但是无信息时如何判定先验分布,是别的学派批评贝叶斯学派的一个重点,为了理论上的完整,就必须处理好这一问题.

2.2 估 计

2.2.1 点估计

通常点估计是用后验分布的期望来估计的．$h(\theta \mid x)$ 的期望实际上就是条件期望 $E\{\theta \mid x\}$，从均方误差的观点来看，把样本 x 和参数 θ 都看成随机变量时，使得 $E(\theta - f(x))^2$ 达到最小值的 $f(x)$ 就是条件期望 $E\{\theta \mid x\}$．

另一种考虑是用后验分布密度的最大值点来估计 θ，即 $\hat{\theta}$ 使等式

$$h(\hat{\theta} \mid x) = \max_{\theta} h(\theta \mid x) \tag{2-7}$$

成立，不存在最大值时，将 max 改成 sup．注意，$h(\theta \mid x) \propto \pi(\theta)p(x \mid \theta)$，因此使 $h(\theta \mid x)$ 达到最大值的 $\hat{\theta}$，一定也使 $\pi(\theta)p(x \mid \theta)$ 达到最大值，这一估计称为**最大后验密度估计**．如果先验分布采用贝叶斯假设，即 $\pi(\theta) \propto 1$，此时就有

$$h(\theta \mid x) \propto p(x \mid \theta) = L(\theta),$$

最大后验密度估计就是最大似然估计．下面用二项分布作为例子来说明这一点．

设先验分布是共轭分布 $\beta(a,b)$，于是从 2.1 节已知后验分布是 $\beta(a+r, n+b-r)$，贝塔分布 $\beta(a,b)$ 的期望值是已知的，它是 $a/(a+b)$，因此，二项分布中事件 A 发生的概率 θ 的贝叶斯估计是

$$\hat{\theta} = (a+r)/(n+a+b). \tag{2-8}$$

特别地，采用贝叶斯假设时，就有 $a = b = 1$，于是式(2-8)就给出估计 $\hat{\theta} = (r+1)/(n+2)$．采用贝叶斯假设时，最大后验密度估计就是最大似然估计，它用频率 r/n 去估计概率 θ，与经典学派的结论相同．从这里也可以看到贝叶斯学派与经典学派的联系与区别．

2.2.2 区间估计

已知参数 θ 的后验分布为 $h(\theta \mid x)$，对于给定的置信概率 $1-\alpha, 0<\alpha<1$，如果存在区域 D 满足下面两个条件：

1° $P(\theta \in D \mid x) = \int_D h(\theta \mid x)\mathrm{d}\theta = 1-\alpha,$

2° 任给 $\theta_1 \in D, \theta_2 \in D$，总有不等式

$$h(\theta_1 \mid x) \geqslant h(\theta_2 \mid x),$$

则称 D 是 θ 的**最高后验区域估计**．D 这个区域集中了使后验分布密度取值尽可能大(高)的点．下面用一个正态分布的例子来说明．

设 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 是来自 $N(0,\sigma^2)$ 的一个样本，未知参数是 σ^2，求 σ^2 的区间估计．

采用贝叶斯假设，此时

$$h(\sigma^2 \mid x) \propto \frac{\exp\left(-\sum_{i=1}^{n} x_i^2/(2\sigma^2)\right)}{\sigma^n},$$

于是 σ^2 遵从的后验分布是逆伽玛分布．为了方便，将其密度写为如下形式：

$$\gamma(\sigma^2; a, b) = \frac{b^a}{\Gamma(a)(\sigma^2)^{a+1}} \exp(-b/\sigma^2),$$

其中
$$a = \left(\frac{n}{2} - 1\right), \quad b = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}{2}.$$

注意到 $\gamma(\sigma^2 \mid a, b)$ 的密度是非对称的，因此对称地截取分位点并不能得到最高后验密度区域．对于置信概率 $1-\alpha$，该区域为由满足下列等式的 c_1 和 c_2 构成的区间 $[c_1, c_2]$：

(1)　$P(c_1 \leqslant \sigma^2 \leqslant c_2) = \int_{c_1}^{c_2} \gamma(\sigma^2 \mid a, b) \mathrm{d}\sigma^2 = 1 - \alpha,$

(2)　$\gamma(c_1 \mid a, b) = \gamma(c_2 \mid a, b).$

这一结果与经典方法常见的置信区间是不完全相同的．

2.3　假设检验和判别

对于统计中的假设检验问题，贝叶斯方法也是采用后验分布．设样本 x 遵从分布密度 $p(x \mid \theta)$，θ 的变化范围是 Θ，$\Theta_0 \subset \Theta$ 是一个真子集，待检验的零假设是 $H_0: \theta \in \Theta_0$，对立假设是 $H_1: \theta \in \Theta \setminus \Theta_0$．若已知先验分布 $\pi(\theta)$，又观察到样本 x，则从后验概率 $P(\theta \in \Theta_0 \mid x)$ 与 $P(\theta \in \Theta \setminus \Theta_0 \mid x)$ 的大小就可以判断 H_0 是否成立：当 $P(\theta \in \Theta_0 \mid x) > P(\theta \overline{\in} \Theta_0 \mid x)$ 时，就认为 H_0 成立，否则就认为不成立．从后验密度 $h(\theta \mid x)$ 的表达式可知 $P(\theta \in \Theta_0 \mid x) > P(\theta \overline{\in} \Theta_0 \mid x)$ 的充分必要条件是

$$\int_{\Theta_0} \pi(\theta) p(x \mid \theta) \mathrm{d}\theta > \int_{\Theta \setminus \Theta_0} \pi(\theta) p(x \mid \theta) \mathrm{d}\theta.$$

按先验分布来计算，H_0 与 H_1 相应的概率分别是

$$\pi(\theta \in \Theta_0) = \int_{\Theta_0} \pi(\theta) \mathrm{d}\theta$$

与

$$\pi(\theta \overline{\in} \Theta_0) = \int_{\Theta \setminus \Theta_0} \pi(\theta) \mathrm{d}\theta,$$

由于观察到样本 x 之后，人们的认识调整为 $P(\theta \in \Theta_0 \mid x)$ 与 $P(\theta \overline{\in} \Theta_0 \mid x)$，从比值来看，有

$$\frac{P(\theta \in \Theta_0 \mid x)}{P(\theta \bar{\in} \Theta_0 \mid x)} = \frac{\pi(\theta \in \Theta_0)}{\pi(\theta \bar{\in} \Theta_0)} \quad \frac{\dfrac{P(\theta \in \Theta_0 \mid x)}{P(\theta \bar{\in} \Theta_0 \mid x)}}{\dfrac{\pi(\theta \in \Theta_0)}{\pi(\theta \bar{\in} \Theta_0)}}$$

$$\xlongequal{\text{def}} \frac{\pi(\theta \in \Theta_0)}{\pi(\theta \bar{\in} \Theta_0)} \mathrm{B}^{\pi}(x).$$

其中 $\mathrm{B}^{\pi}(x)$ 是在观察到样本 x 后,调整先验认识的一项因式,称之为**贝叶斯因子**.贝叶斯因子用 $\pi(\theta)$ 和积分表示就是

$$\mathrm{B}^{\pi}(x) = \frac{\displaystyle\int_{\Theta_0} \pi(\theta) p(x \mid \theta) \mathrm{d}\theta}{\displaystyle\int_{\Theta \setminus \Theta_0} \pi(\theta) p(x \mid \theta) \mathrm{d}\theta} \quad \frac{\displaystyle\int_{\Theta \setminus \Theta_0} \pi(\theta) \mathrm{d}\theta}{\displaystyle\int_{\Theta_0} \pi(\theta) \mathrm{d}\theta}.$$

特别地,如果 $\Theta = \{\theta_0, \theta_1\}$, $\Theta_0 = \{\theta_0\}$,则

$$\mathrm{B}^{\pi}(x) = \frac{p(x \mid \theta_0)}{p(x \mid \theta_1)},$$

它就是似然比,所以在贝叶斯分析中,用比值来反映比差值更方便.

假设检验可以看成是两类判别,所以多类判别是假设检验的一种自然推广.多类判别的问题和处理方法如下:

设有 k 类假设检验问题,第 i 类的分布密度是 $p_i(x)$, $i = 1,2,\cdots,k$. 那么,观察到样本 x 之后,应将 x 归于哪一类?设先验分布已知,属于第 i 类的先验概率是 π_i, $i = 1,2,\cdots,k$,于是由 Bayes 公式知道,“$x \in G_i$”(x 属于第 i 类)的后验概率是

$$h(x \in G_i \mid x) = \frac{\pi_i p_i(x)}{\sum\limits_{j=1}^{k} \pi_j p_j(x)} \qquad (i = 1,2,\cdots,k).$$

因此可根据后验概率的大小来判定 x 的类别,将 x 归于 $\pi_i p_i(x) = \max\limits_j \pi_j p_j(x)$ 的这一类.

现在以正态分布为例来说明这一点.设有 k 个总体,第 i 个总体 G_i 相应的密度是 p 维多元正态 $N(\mu_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$,先验概率是 π_i, $i = 1,2,\cdots,k$. 于是,在观察到样本 $\boldsymbol{x}$ 之后,后验概率之比就是

$$\frac{\pi_i p_i(\boldsymbol{x})}{\pi_j p_j(\boldsymbol{x})} = \left(\frac{|\boldsymbol{\Sigma}_i|}{|\boldsymbol{\Sigma}_j|}\right)^{-1/2} \exp\left(\frac{\theta_{ij}}{2}\right) \left(\frac{\pi_i}{\pi_j}\right),$$

其中

$$\theta_{ij} = (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_j)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}_j^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_j) - (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i).$$

因此,可得

$$\frac{\pi_i p_i(\boldsymbol{x})}{\pi_j p_j(\boldsymbol{x})} > 1$$

的充分必要条件是 $\ln\left(\dfrac{\pi_i p_i(\boldsymbol{x})}{\pi_j p_j(\boldsymbol{x})}\right) > 0$,即

$$\frac{\theta_{ij}}{2} > (\frac{1}{2})\ln\left(\frac{|\boldsymbol{\Sigma}_i|}{|\boldsymbol{\Sigma}_j|}\right) + \ln\left(\frac{\pi_j}{\pi_i}\right) \xlongequal{\text{def}} c_{ij},$$

也即

$$(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_j)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_j^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_j) - (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i) > 2c_{ij}.$$

容易看出,当 $\boldsymbol{\Sigma}_i$ 均相等时,问题就简化为 $\boldsymbol{x}$ 的线性函数是否大于0. 当 $k=2$ 时,就是似然比是否大于某个确定的值. 因此用贝叶斯方法来处理时,假设检验与多类判别可以纳入一个框架.

当总体密度 $p_i(x)$中的参数是未知的时,判别问题又该如何处理呢? 这时需要有训练样本,即已知归入各类的各种样本值. 首先利用训练样本估计参数,然后再将估计的参数作为已知参数,代入密度来作出判别.

3 贝叶斯决策

3.1 决策问题

决策问题是人们经常遇到的,它不一定与统计试验有关,这里只谈与统计试验有关的决策问题,所以也称为统计决策. 贝叶斯方法的一个重要影响就是渗入到非统计的决策问题,这也不是这里讨论的内容.

统计决策问题有三个要素:参数空间、样本空间和行动空间. 统计决策可视为人与自然界的一种博弈,参数空间反映自然界的客观状态,也称为状态空间,参数空间中每一个点(一个状态)称为自然界的纯策略,参数空间上的先验分布称为自然界的混合策略. 样本空间反映统计试验,通过取样了解参数的信息,所以样本空间是一个概率空间,但它的概率测度不是一个,而是与参数有关的一族测度. 行动空间是人们采取的措施. 通常用$(\Omega,\mathscr{F},\pi)$描述参数空间,π 是先验分布;用$(X,\mathscr{B},P_\omega)$描述样本空间,对于每个 $\omega\in\Omega$, P_ω 是一个概率测度;用 A 表示行动空间. 如何从 A 中选择行动 a 呢? 这与损失函数有关. 损失函数是定义在 $\Omega\times A$ 上的函数 $L(\omega,a)$,它表示当自然界处于状态 ω 时,人们采取行动 a 所遭受的损失.

假定 $L(\omega,a)$是非负的. 由于人们是根据统计试验的结果 $x(x\in X)$来选择自己的行动的,所以行动 a 依赖于样本 x,记为 $a(x)$,称为人们的一个策略,也称为**决策函数**. 它是一个统计量. 因而 $L(\omega,a(x))$是一个随机变量,它的期望

$$R(\omega,a(x)) = \int L(\omega,a(x))p(x\mid\omega)\mathrm{d}x$$

称为**风险函数**,此处 $p(x\mid\omega)$ 是 P_ω 的密度. 如果考虑到自然界的混合策略 $\pi(\omega)$,则人们的平均风险是风险函数对 $\pi(\omega)$ 求平均:

$$R(\pi,a(x)) = \int R(\omega,a(x))\pi(\omega)\mathrm{d}\omega,$$

称它为对 π 的**贝叶斯风险**,其中 $\pi(\omega)$是 π 的密度. 一个先验分布 $\pi(\omega)$与一个决

策函数 $a(x)$就决定了贝叶斯风险 $R(\pi,a(x))$的值．对于给定的先验分布 π，如果决策函数 $a_*(x)$使得

$$R(\pi,a_*(x))=\min_{a(x)}R(\pi,a(x)),\tag{3-1}$$

则称 $a_*(x)$是针对 π 的**贝叶斯解**，或简称 $a_*(x)$是贝叶斯解．很明显，对于给定的先验分布，决策问题的核心便是寻求贝叶斯解．

贝叶斯方法的优点是很容易求得相应的贝叶斯解．其关键是利用后验分布 $h(\omega|x)$. 称损失函数对后验分布的期望

$$R(\pi,a(x)\mid x)=\int L(\omega,a(x))h(\omega\mid x)\mathrm{d}\omega\tag{3-2}$$

为**后验风险**．容易看出，记

$$q(x)=\int\pi(\omega)p(x\mid\omega)\mathrm{d}\omega$$

后，就有

$$\begin{aligned}R(\pi,a(x))&=\iint L(\omega,a(x))p(x\mid\omega)\pi(\omega)\mathrm{d}x\mathrm{d}\omega\\&=\int q(x)\mathrm{d}x\int L(\omega,a(x))h(\omega\mid x)\mathrm{d}\omega,\end{aligned}$$

把 $q(x)$ 看成 x 的边缘分布，则贝叶斯风险就是后验风险 $R(\pi,a(x)\mid x)$ 对 $q(x)$ 的平均．于是可得到下面的定理．

定理 1 若对于每一个 x，$a(x)$ 使 $R(\pi,a(x)\mid x)$ 达到最小，则 $a(x)$ 就是针对 π 的贝叶斯解．

在这里不去细致讨论一些与可测性、可积性有关的条件．定理 1 给出了许多问题的一种普遍性的解法，它的一个特例就是在估计问题中，损失函数选用平方误差时，贝叶斯解就是条件期望 $E\{\omega\mid x\}$. 在假设检验问题中，当 $\Omega=\{\omega_0,\omega_1\}$ 时，损失函数

$$L(\omega_i,a_j)=\delta_{ij}\qquad(i,j=0,1),$$

其中 a_1 表示拒绝 $H_0:\omega=\omega_0$，a_0 表示接受 $H_0:\omega=\omega_0$. 当 $i=j$ 时，$\delta_{ij}=0$，否则 $\delta_{ij}=1$. 由式(3-2) 及定理 1 导出的检验方法就是经典学派中的奈曼 - 皮尔逊引理的结果．很容易将这个方法推广到多类判别中．贝叶斯决策用一个框架可以处理各种类型的问题．

3.2 优良性准则

有了度量损失的风险，就可以从风险的大小来确定决策函数的好坏，这就需要有比较决策函数优劣的一些准则．下面只能介绍一些重要而基本的概念．

3.2.1 容许性与完全类

一个决策函数 $a(x)$ 的风险函数 $R(\omega,a(x))$ 是参数 ω 的函数．如果

$$R(\omega,a_1(x))\leqslant R(\omega,a_2(x))\quad(\forall\,\omega\in\Omega)$$

都成立，并且至少对于一个 ω 不等号成立，则称 $a_1(x)$ 一致优于 $a_2(x)$．如果对于 $a(x)$，不存在一致优于它的决策函数，则称 $a(x)$ 是容许的，否则就称它为不容许的．很明显，不希望所采用的策略是不容许的．然而，有可能所有的策略都是不容许的．

如果对于不属于给定决策函数类的任一决策函数，在该类中都能找到一个决策函数一致优于它，则称这个决策函数类为完全类．显然，如果存在一个完全类，就不必考虑这个类以外的任何策略，从而缩小了必须考虑的范围．所以寻找一个完全类，乃至一个尽可能小的完全类是很重要的．如果一个完全类，它的任何真子集都不再是完全类，则称这个完全类为**最小完全类**．

3.2.2　极小化极大准则

极小化极大准则用英文表示是 minimax 准则，这是从博弈论引用来的．如果一个决策函数一致优于其他任一决策函数，则称该决策函数是一致最优的．但是，这种决策函数一般都不存在．有时，人们最关心的是最大风险 $\sup\limits_{\omega} R(\omega, a(x))$．

如果 $a_*(x)$ 使得

$$\sup_{\omega} R(\omega, a_*(x)) = \inf_{a(x)} \sup_{\omega} R(\omega, a(x)), \tag{3-3}$$

则称 $a_*(x)$ 是一个**极小化极大解**．

很明显，最大损失达到最小无疑是一种优良性质．如何去获得极小化极大解呢？在贝叶斯方法中，有下述定理．

定理 2　若 $a(x)$ 是一个贝叶斯解，并且

$$R(\omega, a(x)) = C \quad (\forall \omega \in \Omega)$$

都成立，则 $a(x)$ 一定是一个极小化极大解．

下面用二项分布作为例子来说明．设未知参数是事件 B 发生的概率 ω，$\Omega = [0,1]$，n 次试验中 B 发生的次数 x 遵从 $\binom{n}{x}\omega^x(1-\omega)^{n-x}$，则当行动空间 $A = [0,1]$，参数为 ω，行动为 a 时，相应的损失函数可选用 $(\omega - a)^2$．当先验分布选用 $\beta(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 时，其贝叶斯解 $a_*(x) = (x + \sqrt{n}/2)/(n + \sqrt{n})$ 的风险函数为

$$R(\omega, a_*(x)) = \frac{1}{4 + (1 + \sqrt{n})^2},$$

它与 ω 无关，因此，$a_*(x)$ 是 ω 的极小化极大估计．

3.2.3　贝叶斯解的容许性和完全类

贝叶斯解与决策函数的**容许性**和完全类有很密切的关系．这主要体现在下面几条定理中．

定理 3　如果一个决策问题的贝叶斯解是唯一的，则此解一定是容许的．

定理 4　设参数空间 $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \cdots\}$，先验分布 $\pi(\omega_i) > 0, i = 1,2,\cdots$，则 π 相应的贝叶斯解是容许的．

定理 5　设参数空间 $\Omega = \mathbf{R}^p$，Ω 即为 p 维欧氏空间，且任意决策函数的风验函

数都是 ω 的连续函数．若先验分布 π 在 Ω 的任一正半径的球上都有正的概率，则 π 相应的贝叶斯解是容许的．

定理6 设 A 与 Ω 均为欧氏空间的有界闭集，损失函数 $L(\omega,a)$ 是 a 的连续函数，且任意决策函数的风险函数也都是连续的，则全体贝叶斯解形成一个完全类．

这些定理显示了贝叶斯解的种种优良性和它在决策中的重要地位．

3.3 对近代统计的作用

贝叶斯学派的工作对经典学派的理论和方法的发展有很好的促进作用，经典学派对贝叶斯学派的研究也起了同样的促进作用．贝叶斯学派的优点是比较容易结合实际、启发人们去总结经验，这就很好地促进了统计的应用；反过来，又推动了统计的发展．统计在某种意义上就是从经验、实验、实际情况中归纳、总结、寻找规律的一门方法论、工具性的学科，贝叶斯方法与这一特点非常吻合，因而得到实际工作者的广泛支持．正是在统计中有几个不同学派的争论，使得统计学科比其他学科有更好的学术争论的气氛和传统，一些杂志公开刊印辩论的论文、发言，不同学派有自己的学术刊物，又互相渗透，这无疑大大地推动了整个统计的发展．

经典学派把统计问题引向一个决策问题是十分自然的，而且也是必然的趋势．因此研究容许性、完全类就成为一些重要的理论课题，从上一节的介绍就可以看出，贝叶斯解在其中扮演了一个非常重要的角色．经典学派可以不承认贝叶斯学派的观点，但不排除用贝叶斯方法去寻找他们想要的解，证明某些方法的优良性．

在经典统计中，UMP（一致最强）检验被认为是一种好的检验方法，但如何去寻找这一类检验，却并不是容易的．然而，在贝叶斯统计中，可以通过**最不利先验分布**构造出相应的 UMP 检验．

考虑 $H_0:\theta\in\Theta_0\leftrightarrow H_1:\theta=\theta_1$，$\pi$ 是在 Θ_0 上的先验分布，样本 x 的边缘分布为

$$m_\pi(x)=\int_{\Theta_0}\pi(\theta)p(x\mid\theta)\mathrm{d}\theta,$$

于是检验问题转化为

$$H_0:x\sim m_\pi(x)\leftrightarrow H_1:x\sim p(x\mid\theta_1).$$

因此，用奈曼－皮尔逊引理，有 UMP 检验：

$$\varphi_\pi(x)=\begin{cases}1 & (m_\pi(x)>kp(x\mid\theta_1));\\ 0 & (\text{其他}).\end{cases}$$

其中 k 由水平 α 确定，

$$\int_{m_\pi(x)>kp(x\mid\theta_1)}m_\pi(x)\mathrm{d}x=\alpha.$$

该检验具有功效 $\beta_\pi=P_{\theta_1}\{\varphi_\pi(x)=0\}$．于是，最不利先验分布就是使 β_π 达到最大的 π．

贝叶斯方法的一个重要方面是如何计算后验分布、后验损失．后验分布涉及到积分的表达式．有时，即使有一个精确的表达式，但实际上却无法使用；相反，一

个近似的公式却用起来效果不错．所以在计算方面，贝叶斯方法本身就需要深入地探讨算法．20世纪90年代发展起来的**吉布斯(J.W.Gibbs)抽样**，就是一个明显的例子．它起源于一个简单的迭代算法：

设后验分布 $\pi_1(\theta \mid x,\lambda)$ 依赖于 x 及 λ，且 $\pi_2(\lambda \mid x,\theta)$ 依赖于 x,θ，于是从随便给定的一个 $\lambda^{(0)}$ 开始，

从 $\pi_1(\theta \mid x,\lambda^{(i-1)})$ 中生成 $\theta^{(i)}$；

从 $\pi_2(\lambda \mid x,\theta^{(i)})$ 中生成 $\lambda^{(i)}$；

…………

这样循环下去，只要次数相当大，$\theta^{(k)}$ 可以看成是 $\pi(\theta \mid x)$ 的观察值而与初值 $\lambda^{(0)}$ 无关．换句话说，序列 $\{\theta^{(k)}\}$ 是遍历的，且具有极限分布 $\pi(\theta \mid x)$，所需的条件是一般性的正则条件，例如有如下的定理．

定理7 设 θ 和 λ 分别取值于紧空间 Θ 和 Λ，若 $\pi_1(\theta \mid x,\lambda)$ 在 Θ 上恒为正，$\pi_2(\lambda \mid x,\theta)$ 在 Λ 上恒为正，则序列 $\{\theta^{(k)}\}$ 与 $\{\lambda^{(k)}\}$ 均为遍历的马尔可夫链，且分别具有极限分布 $\pi(\theta \mid x)$ 和 $\pi(\lambda \mid x)$．

下面用一个例来说明这一算法的特点．在经典方法中，混合分布的参数估计是非常困难的，现在用吉布斯抽样的算法来考察一下．

例1 设

$$x \sim p(x \mid \theta) = \sum_{j=1}^{k} p_j \varphi(x \mid \mu_j,\sigma_j),$$

其中 p_j,μ_j,σ_j 均为未知参数；

$$\theta = (p_1,\mu_1,\sigma_1,\cdots,p_k,\mu_k,\sigma_k).$$

现有一组样本 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，将每个 x_i 对应于一个向量 z_i，$z_i = (z_{i1},z_{i2},\cdots,z_{ik})$，

$$z_{ij} = \begin{cases} 1 & (\text{当 } x_i \text{ 来自 } N(\mu_j,\sigma_j^2),\ j = 1,2,\cdots,k), \\ 0 & (\text{其他}). \end{cases}$$

$$\sum_{j=1}^{k} z_{ij} = 1.$$

注意，$\varphi(x \mid \mu_j,\sigma_j)$ 是 $N(\mu_j,\sigma_j^2)$ 的密度函数，因此，估计 θ 是一个典型的混合总体估计问题．

先验分布采用共轭分布，即 μ_j 对 σ_j 的条件分布 $\pi_j(\mu_j \mid \sigma_j)$ 是正态分布 $N(\xi_j,\sigma_j^2/n_j)$，σ_j^2 的分布 $\pi_j(\sigma_j^2)$ 是逆伽玛分布 $I\Gamma(v_j/2,s_j^2/2)$，$\pi(p_1,p_2,\cdots,p_k)$ 是狄利克雷(P.G.L.Dirichlet)分布 $D_k(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_k)$，其中 ξ_j,n_j,v_j 和 s_j 都是已知常数．于是后验分布就是

$$z_i \mid x_i,\theta \sim \mu_k(1;f_1(x_i \mid \theta),\cdots,f_k(x_i \mid \theta)),$$

其中 μ_k 为多项分布；

$$f_j(x_i \mid \theta) = \frac{p_j \varphi(x_i \mid \mu_j,\sigma_j)}{\sum_{t=1}^{k} \varphi(x_i \mid \mu_t,\sigma_t) p_t};$$

$$\mu_j \mid \boldsymbol{X},\boldsymbol{Z},\sigma_j \sim N\left(\xi_j(\boldsymbol{X},\boldsymbol{Z}),\frac{\sigma_j}{n_j+\sigma_j^2}\right);$$

$$\sqrt{\sigma_j^2} \mid \boldsymbol{X},\boldsymbol{Z} \sim I\Gamma\left(\frac{\nu_j+n_j}{2},\frac{s_j^2+\widehat{s_j^2}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{Z})+\dfrac{n_j m_j(\boldsymbol{Z})(\bar{x}_j(\boldsymbol{Z})-\xi_j)^2}{n_j+m_j(\boldsymbol{Z})}}{2}\right);$$

$$p_j \mid \boldsymbol{X},\boldsymbol{Z} \sim D_k(\alpha_1+m_1(\boldsymbol{Z}),\cdots,\alpha_k+m_k(\boldsymbol{Z})).$$

$$\boldsymbol{X}=(x_1,x_2,\cdots,x_n);$$

$$\boldsymbol{Z}=(z_1,z_2,\cdots,z_n)^{\mathrm{T}};$$

$$m_j(\boldsymbol{Z})=\sum_{i=1}^{n} z_{ij};$$

$$\overline{x_j}(\boldsymbol{Z})=\frac{1}{m_j(\boldsymbol{Z})}\sum_{i=1}^{n} z_{ij}x_i;$$

$$\xi_j(\boldsymbol{X},\boldsymbol{Z})=\frac{n_j\xi_j+m_j(\boldsymbol{Z})\bar{x}_j(\boldsymbol{Z})}{n_j+m_j(\boldsymbol{Z})};$$

$$\widehat{s_j^2}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{Z})=\sum_{i=1}^{n} z_{ij}(x_i-\bar{x}_j(\boldsymbol{Z}))^2$$

从上述后验分布,可以导出很方便的吉布斯抽样,并且获得估计.

贝叶斯方法在各方面的应用将在最后一章中给以介绍.

4 经验贝叶斯方法

4.1 经验贝叶斯的思想

贝叶斯方法的难点是如何选择合适的先验分布.在不少实际场合,存在许多以往的试验数据(历史样本),它们蕴含着有关先验分布的信息.因此可以利用这些历史样本,连同当前样本一起,去估计先验分布,或者避开选择先验分布这一难点,直接去估计所论决策问题的贝叶斯解.

下面先用两个例子来说明这一方法,然后再将它一般化.

例 1 设总体的分布是泊松(S.D.Poisson)分布,参数为 θ,于是密度函数

$$p(x\mid\theta)=\frac{\theta^x \mathrm{e}^{-\theta}}{x!} \qquad (x=0,1,2,\cdots),$$

损失函数 $L(\theta,a)=(\theta-a)^2$.对先验分布 $\pi(\theta)$ 而言,贝叶斯解是估计量(观察到 x 之后):

$$\hat{\theta}(x)=E\{\theta\mid x\}=\frac{\int_0^\infty \theta\cdot\theta^x \mathrm{e}^{-\theta}\pi(\theta)\mathrm{d}\theta}{(x!m(x))},$$

其中

$$m(x)=\frac{\int_0^{\infty}\theta^x e^{-\theta}\pi(\theta)\mathrm{d}\theta}{x!},$$

$m(x)$ 是样本 x 的边缘分布．于是 $\hat{\theta}(x)$ 可以用边缘分布 $m(x)$ 表示成：

$$\hat{\theta}(x)=\frac{(x+1)m(x+1)}{m(x)}. \tag{4-1}$$

这一事实说明，为获得 θ 的估计量，可以不去管先验分布 $\pi(\theta)$，只要估计出 $m(x+1)/m(x)$ 就足够了．

例 2 设样本 x 服从二项分布，参数为 ω，于是

$$p(x\mid\omega)=\binom{n}{x}\omega^x(1-\omega)^{n-x},$$

先验分布采用 $\beta(a,b)$，因此 x 的边缘分布

$$m(x)=\frac{\binom{n}{x}\int_0^1\omega^{x+a-1}(1-\omega)^{n+b-x-1}\mathrm{d}\omega}{\beta(a,b)}. \tag{4-2}$$

用 $L(\omega,d)=(\omega-d)^2$ 作为损失函数．ω 的贝叶斯估计是条件期望 $E\{\omega\mid x\}$，所以估计量

$$\hat{\omega}=\frac{\binom{n}{x}\int_0^1\omega^{x+a}(1-\omega)^{n+b-x-1}\mathrm{d}\omega}{m(x)\beta(a,b)}. \tag{4-3}$$

为计算出 $\hat{\omega}$，只需知道先验分布中的两个参数 a 与 b 即可．

值得注意的是，$m(x)$ 中也含有两个参数 a 和 b．如果有历史样本 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，就可使用矩估计或最大似然估计去求 $m(x)$ 中的参数 a,b，然后再代入 $\hat{\omega}$ 的表达式中求出 $\hat{\omega}$．于是，先验分布中的参数是用经典方法估计，估计 ω 用的是贝叶斯方法，这样两种方法都用上了．

至此，**经验贝叶斯方法**可总结如下：

设样本 x 遵从条件分布 $p(x\mid\omega)$，参数 ω 的先验分布 $\pi(\omega)$ 未知，于是 x 的边缘分布 $m(x)$ 也未知．设有历史样本 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，对于 $i=1,2,\cdots,n$，

$$x_i\sim p(x\mid\omega_i),\quad \omega_i\sim\pi(\omega),$$

且 $(x,\omega),(x_i,\omega_i)$ 相互独立．于是，可将 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，或 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n,x)$ 看作取自 $m(x)$ 的 i.i.d. 样本，它们间接地提供了关于先验分布的信息．所以，在构造决策函数时，除了利用当前样本 x 外，还可以利用历史样本．这种决策函数称为经验贝叶斯决策函数．值得注意的是，构造经验贝叶斯决策函数尚无通用的方法．

如果 ω 的先验分布属于一已知参数族，记先验分布为 $\pi(\omega,\theta)$，x 的边缘分布为 $m(x,\theta)$，此处 θ 称为**超参数**，于是，可根据 m 的 i.i.d. 样本 x，用经典统计方法，如极大似然法、矩法等，得到 θ 的估计 $\hat{\theta}$，从而可用 $\pi(\omega,\hat{\theta})$ 作为先验分布的估计，

并以其贝叶斯解为经验贝叶斯决策函数(如例 2). 这种方法称为参数经验贝叶斯方法 .

如果决策问题的贝叶斯解可以表示为 $\psi(x,\varphi(m))$, 其中 ψ 和 φ 是两个已知的函数,例如式(4-1),则可用取自 m 的 i.i.d. 样本 x 去估计 $\varphi(m)$,记估计量为 $\widehat{\varphi}(m)$. 然后用 $\psi(x,\widehat{\varphi}(m))$ 直接估计贝叶斯解 $\psi(x,\varphi(m))$,作为决策问题的经验贝叶斯决策函数 . 这种方法称为非参数经验贝叶斯方法 . 因为它由罗宾斯首先提出来,所以也称为罗宾斯经验贝叶斯方法 .

当然,也可以由 i.i.d. 样本 x 构成经验分布函数 $F_n^*(x)$,因为 x 的边缘分布函数 $F_n(x)$ 与先验分布 $\pi(\omega)$ 应有如下关系式:

$$F(x)=\int_{-\infty}^{x} m(y)\mathrm{d}y=\int_{-\infty}^{x}\int_{\Omega} p(y\mid\omega)\pi(\omega)\mathrm{d}\omega\mathrm{d}y.$$

所以用 $F_n^*(x)$ 代入上式的 $F(x)$,就有

$$F_n^*(x)=\int_{-\infty}^{x}\mathrm{d}y\int p(y\mid\omega)\pi(\omega)\mathrm{d}\omega.$$

由于 $p(y\mid\omega)$ 是已知的,所以应选 $\pi(\omega)$ 使上式两端尽可能接近,以判别信息量作为二者的差距,即要选 $\pi(\omega)$ 使

$$\int\ln\left(\int p(x\mid\omega)\pi(\omega)\mathrm{d}\omega\right)\mathrm{d}F_n^*(x)$$

达到最大,也就是要使

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ln\int p(x_i\mid\omega)\pi(\omega)\mathrm{d}\omega$$

达到最大 . 当 $\pi(\omega)$ 由它的参数 θ 决定时,记

$$m(x_i\mid\theta)=\int p(x_i\mid\omega)\pi(\omega\mid\theta)\mathrm{d}\omega$$

后,就成为要选 θ 使 $\sum_{i=1}^{n}\ln m(x_i\mid\theta)$ 达到最大,这就是最大似然估计 .

当然可以有各种方法通过历史样本去求出先验分布,所以经验贝叶斯方法的一个关键之处,就是要有历史样本 .

4.2　优　良　性

讨论经验贝叶斯估计的优良性时,还是应从贝叶斯风险出发 . 当先验分布 $\pi(\theta)$ 已知时,针对贝叶斯解 $a_*(\pi)$ 的贝叶斯风险是

$$R(\pi,a_*(x))\xlongequal{\text{def}}R_\pi(a_*(x)).$$

对于经验贝叶斯估计 $\delta(x)$ 而言,它不仅依赖于当前样本 x,还依赖于历史样本 $x_1,x_2,\cdots,x_n$,因此,决策函数 $\delta(x)$ 实际上是 $\delta(x\mid x_1,x_2,\cdots,x_n)$,相应的贝叶斯风险 $R_\pi(\delta(x\mid x_1,x_2,\cdots,x_n))$ 就与历史样本 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的值有关,用 E_n 表示对 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 求期望,于是它的平均贝叶斯风险就是 $E_n(R_\pi(\delta(x\mid x_1,x_2,\cdots,x_n)))$. 这就

引出如下定义.

定义1 若对于给定的 $p(x\mid\theta)$ 和先验分布 π,经验贝叶斯估计 $\widehat{\theta}_n(x)=\delta(x\mid x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 满足

$$R_\pi(\widehat{\theta}_n(x))\xrightarrow{\text{in}P}R_\pi(a_*(x))\qquad(n\to\infty),\tag{4-4}$$

即 $R_\pi(\widehat{\theta}_n(x))$ 依概率收敛于 $R_\pi(a_*(x))$,则称 $\widehat{\theta}_n(x)$ 依概率**渐近最优**,记为 $\widehat{\theta}_n(x)$ 是 a.o.(P). 如果 $\widehat{\theta}_n(x)$ 满足

$$E_n(R_\pi(\widehat{\theta}_n(x)))\to R_\pi(a_*(x))\qquad(n\to\infty),\tag{4-5}$$

则称 $\widehat{\theta}_n(x)$ 是平均**渐近最优**,记为 $\widehat{\theta}_n(x)$ 是 a.o.(E).

很明显,定义1中的渐近最优性是对一个具体的先验分布 π 而言的,但实际上使用经验贝叶斯估计时,并不知道先验分布 π 是什么,所以,如果优良性对于一类先验分布都能成立,则这种优良性就有意义,分布族越广泛,该优良性的意义就越大.

要建立这一类优良性的定理是不容易的,下面定理给出了一些可以判断的方法.

定理1 设存在常数 B 使 $|\widehat{\theta}_n(x)|\leqslant B$,且

$$\int|a_*(x)|^2m(x)\mathrm{d}x<\infty,$$

其中

$$m(x)=\int p(x\mid\theta)\pi(\theta)\mathrm{d}\theta.$$

如果对于使 $|a_*(x)|\leqslant B$ 的每个 x,有

$$\widehat{\theta}_n(x)\xrightarrow{\text{in}P}a_*(x),$$

则当 $n\to\infty$,有

$$\lim_{n\to\infty}(E_n(R_\pi(\widehat{\theta}_n(x))-R_\pi(a_*(x))))$$
$$\leqslant 2\left(\int_{|a_*(x)|\geqslant B}|a_*(x)|^2m(x)\mathrm{d}x+B^2P(|a_*(x)|\geqslant B)\right).$$

从定理结论可以看出,只要 B 足够大,$a_*(x)$ 的高阶矩存在,其 a.o.(E) 还是可以建立的.

对于离散指数族

$$p(x\mid\theta)=h(x)\beta(\theta)\theta^x\qquad(x=0,1,2,\cdots),$$

在二次损失下,θ 的贝叶斯估计为

$$a_*(x)=\frac{h(x)}{h(x+1)}\frac{m(x+1)}{m(x)},$$

可构造经验贝叶斯估计如下:

$$\widehat{\theta}_n(x)=\frac{h(x)}{h(x+1)}\frac{m_n(x+1)}{m_n(x)},$$

其中 $m_n(i)$ 为 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 和 x 中等于 i 的个数．于是它的 a.o.(E) 就依赖于

$$\sum_x |a_*(x)|^r m(x) < \infty$$

对于多大的 r 成立．对于几何分布，很容易验证它是否 a.o.(E)．更一般些，有下面的定理．

定理 2 设存在正整数 k，使

$$h(x) = \begin{cases} 0 & (x < k), \\ \text{正值} & (x \geqslant k), \end{cases}$$

且有常数 A 使

$$h^3(x) \leqslant Ah(x-2)h^2(x+1) \qquad (\forall x \geqslant k+2),$$

成立，于是对先验分布族

$$\mathscr{F} = \left\{\pi(\theta): \int \theta^2 \pi(\theta) \mathrm{d}\theta < \infty\right\}$$

而言，经验贝叶斯估计 $\hat{\theta}_n(x)$ 是 a.o.(E) 的．

4.3 线性经验贝叶斯估计

从以上所述可看到，对于非参数情形，要得到参数 θ 的经验贝叶斯估计，并证明它的渐近最优性，不是一件很容易的事情，并且没有一个统一的方法，必须对不同的概率分布 $p(x \mid \theta)$ 逐个地去做．

罗宾斯在 1983 年提出：将对 θ 的估计限制在 x 的线性函数类中，这样，对于平方误差损失函数和给定的先验分布，不难求得使贝叶斯风险达到最小的线性函数

$$\tilde{\theta}(x) = E(\theta) + \frac{\operatorname{cov}(\theta, x)}{\operatorname{var}(x)}(x - E(x)). \tag{4-6}$$

不妨称它为 θ 的线性贝叶斯估计．当先验分布未知时，可用历史样本 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 去估计 $E(\theta), E(x), \operatorname{var}(x)$ 和 $\operatorname{cov}(\theta, x)$．将这些估计代入式(4-6)，得到的估计 $\tilde{\theta}(x)$，称为 θ 的**线性经验贝叶斯**估计(l. e. B.)，记为 $\hat{\theta}^{\text{leB}}(x)$．为了区别，将上述讨论的不限于线性函数类的经验贝叶斯估计称为一般经验贝叶斯估计(g.e.B.)．

对于同一个 $p(x \mid \theta)$，求 l.e.B. 要比求 g.e.B. 容易得多．当然，线性贝叶斯估计是在 x 的线性函数这一小范围内最优，它的贝叶斯风险一般地应大于贝叶斯估计的贝叶斯风险．如果它们都具有渐近最优性，当 $n \to \infty$ 时，g.e.B. 应当优于 l.e.B.．但是，罗宾斯猜测，l.e.B. 的渐近最优性式(4-4) 或式(4-5) 有比 g.e.B. 更快的收敛速度，从而对于中等大小的 n，l.e.B. 将有可能优于收敛速度更慢的 g.e.B.，罗宾斯的这一猜测对于某些重要的分布类型已被后来的作者证实．

罗宾斯进一步假定

$$E\{x \mid \theta\} = \theta,$$
$$\operatorname{var}\{x \mid \theta\} = a + b\theta + c\theta^2,$$

其中 a, b, c 为已知常数．于是，θ 的线性贝叶斯估计为

$$\hat{\theta}(x) = E(x) + \left(1 - \frac{c\text{var}(x) + a + bE(x) + cE^2(x)}{(c+1)\text{var}(x)}\right)(x - E(x)).$$

用

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i,$$

$$S^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2,$$

分别估计 $E(x)$ 和 $\text{var}(x)$，则得到 θ 的 l.e.B.：

$$\hat{\theta}^{\text{leB}}(x) = \bar{x} + \left(1 - \frac{cS^2 + a + b\bar{x} + c\bar{x}^2}{(c+1)S^2}\right)(x - \bar{x}). \tag{4-7}$$

在(4-7)式中，将 x 换为 x_i，得到

$$\hat{\theta}_i^{\text{leB}} = \hat{\theta}^{\text{leB}}(x_i) = \bar{x} + \left(1 - \frac{cS^2 + a + b\bar{x} + c\bar{x}^2}{(c+1)S^2}\right)(x_i - \bar{x}), \tag{4-8}$$

它是 θ_i 的一个 l.e.B.. 这样，可同时得到对 $\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_n$ 的估计 . 这与著名的斯坦(C. Stein) 估计密切相关 .

设 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 是 n 个独立的观测，$x_i \sim N(\theta_i, 1)$，$i = 1, 2, \cdots, n$，诸 θ_i 是固定的未知参数，它们之间可以没有任何关系 . 那么，如何求在平方误差损失

$$L(\boldsymbol{\theta}, \hat{\boldsymbol{\theta}}) = \sum_{i=1}^{n}(\theta_i - \hat{\theta}_i)^2$$

之下估计这些 θ_i 呢?此处 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_n)^{\mathrm{T}}$，$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \cdots, \hat{\theta}_n)^{\mathrm{T}}$.

1951 年，斯坦首先发现，对于上述估计问题，当 $n \geqslant 3$ 时，通常的估计(MLE) $\hat{\boldsymbol{\theta}}^0 = (\hat{\theta}_1^0, \hat{\theta}_2^0, \cdots, \hat{\theta}_n^0)^{\mathrm{T}}$ 是不容许的，此处 $\hat{\theta}_i^0 = x_i$，$i = 1, 2, \cdots, n$. 事实上，对于 $n \geqslant 3$，分量为

$$\hat{\theta}_i^{\text{JS}} = \left(1 - \frac{c}{S_1^2}\right)x_i \tag{4-9}$$

的詹姆斯 - 斯坦(James-Stein) 估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_c^{\text{JS}}$ 一致优于 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^0$，其中 $S_1^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2$，$c$ 是满足不等式 $0 < c < 2(n-2)$ 的任意常数($c = n-2$ 时最优). 而詹姆斯 - 斯坦估计也不是容许的，其正部 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_c^+ = (\hat{\theta}_1^+, \hat{\theta}_2^+, \cdots, \hat{\theta}_n^+)$ 更优于 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^{\text{JS}}$，此处

$$\hat{\theta}_i^+ = \left(1 - \frac{c}{S_1^2}\right)_+ x_i \qquad (i = 1, 2, \cdots, n), \tag{4-10}$$

而

$$(\cdot)_+ = \max\{0, (\cdot)\}.$$

乍一看来，斯坦的这一发现似乎是荒谬的 —— 怎么能利用华盛顿的苹果价格和巴黎的时装价格的信息，去改进对广州彩电价格的估计!因此被称为斯坦奇论(Stein's paradox).

如果说估计式(4-9) 和式(4-10) 是将 x_i 向 0 压缩，那么，形如

$$\hat{\theta}_i^{\text{EM}} = \bar{x} + \left(1 - \frac{c}{S_2^2}\right)(x_i - x) \tag{4-11}$$

的埃弗朗 - 莫里斯(Efron-Morris)估计便是将 x_i 向另一个自然的中心 $\bar{x}$ 压缩,此处 $S_2^2 = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$. 所以,也称这些估计为压缩估计. 可以证明,当 $n \geqslant 4, 0 < c < 2(n-3)$ 时,埃弗朗 - 莫里斯估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_c^{EM} = (\hat{\theta}_1^{EM}, \hat{\theta}_2^{EM}, \cdots, \hat{\theta}_n^{EM})$ 也一致优于 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^0$(当 $c = n - 3$ 时最优).

对于上面这些奇怪的现象,通过经验贝叶斯方法,得到了一种被认为是迄今最好的解释:如果诸 θ_i 独立地遵从一个共同的先验分布 $N(0, \tau^2)$,则可以用 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 去估计未知的超参数 τ^2,于是 θ_i 的后验期望便具有式(4-9)或式(4-10)的形式;而 l.e.B.式(4-8)正好具有式(4-11)的形式.

当然,这并未完全解释清楚斯坦奇论,因为后者并没有假定对于诸 θ_i,有任何先验信息,而且后来在线性模型中也出现了詹姆斯 - 斯坦估计. 对于泊松分布以及其他的分布,也都出现了类似的结果. 这就开创了一个新的研究方向,并且对统计的哲学思想基础提出了新问题. 这一研究方向今后的发展是否将与经验贝叶斯方法密切相关,或者甚至殊途同归,希望读者拭目以待.

4.4 与其他方法的比较

经验贝叶斯方法与经典方法、贝叶斯方法之间的区别是明显的,它们的主要区别和共同之处由表 4-1 可以看出.

表 4-1

对　象	经典学派看法	贝叶斯学派看法	经验贝叶斯学派看法
参数 θ	未知常数	未知随机变量	未知随机变量
先验分布	不存在	已知	未知
样本分布	已知	是条件分布,已知	是条件分布,已知
后验分布	不存在	已知	未知
边缘分布	不存在	已知	未知

实际上,与经验贝叶斯方法比较接近的是**逐级贝叶斯分析**. 一个逐级贝叶斯模型(hierarchical Bayes model)是:

样本 x 与参数 θ 之间的关系为 $x \sim p(x \mid \theta)$,先验分布 $\pi(\theta) = \pi_1(\theta \mid \theta_1)$,而 $\theta_1 \sim \pi_2(\theta_1 \mid \theta_2), \cdots, \theta_{k-1} \sim \pi_k(\theta_{k-1} \mid \theta_k)$, $\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_k$ 为超参数. 对超参数的处理方法还是要引入它的先验分布,即逐级地使用贝叶斯方法.

经验贝叶斯方法也引入了超参数,先验分布中可以有未知参数,但处理超参数的方法是经典方法,这是二者的区别所在.

实际上,在经典学派的模型中,也有逐级模型与逐级贝叶斯模型相仿,如线性模型中的随机效应模型. 在这种模型中,观察值 y 可以对于一部分因子有固定效应,如年份、品种对植物繁殖生长的影响;而对于另一部分因子是随机效应,如动物

后代的性别．这样，模型可表示为

$$y \sim N(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma}),$$

其中 $\boldsymbol{\theta}$ 可分为两部分：$\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}_{(1)}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{\theta}_{(2)}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{\theta} \sim N(x\beta, \boldsymbol{\Sigma}_2)$，因此，实际上是 $y \mid \boldsymbol{\theta}_{(2)} \sim N(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma})$，或者

$$y \mid \boldsymbol{\theta} \sim N(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma}),$$

$$\boldsymbol{\theta} \sim N\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{\theta}_{(1)} \\ \boldsymbol{\theta}_{(2)} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\Sigma}_2 \end{bmatrix}\right).$$

这即是一种逐级的模型．

又如，一种昆虫一次产卵的个数 N 遵从泊松分布 $P(\lambda)$，每个卵存活发育的概率是 p．于是 N 个卵中长成昆虫的个数 x 遵从二项分布，这就是一个逐级模型：

$$x \mid N, p \sim \binom{N}{x} p^{x}(1-p)^{N-x},$$

$$N \sim \frac{\lambda^{N}}{N!}\exp^{(-\lambda)} \qquad (N = 0, 1, 2, \cdots).$$

这时，对 p 的处理就会有不同的看法，不同的学派就会有不相同的处理办法．

逐级贝叶斯模型的讨论在统计中日益受到重视，原因是一方面一些实际问题确实有这种分级的层次结构；另一方面，近代统计中的集成分析(meta-analysis)也需要这种逐级贝叶斯模型．这就要求在应用贝叶斯分析方法之前，要考虑一下哪些是实际问题数据结构中已有的先验信息，哪些不是与结构有关的先验信息．例如海浪是多种频率、振幅的波混合而成的，它是一个混合的总体，这个结构就提供了先验信息．而振幅会是什么分布？频率又会是什么分布？这就需要用实测资料来分析，事先从结构上是不好判断的．

对于逐级贝叶斯模型，在哪一级上或哪些级上使用经典方法估计参数，这也是可以考虑的，这样就把经验贝叶斯方法扩展到了逐级的贝叶斯模型．

总之，经典学派的方法、贝叶斯学派的方法、经验贝叶斯方法，都是处理实际资料的一种手段，从什么观点去考虑才合适，是随实际问题而变的．因此，用不同的方法去处理，比较分析它们，然后再下结论，才是比较科学的态度．

5 应　　用

5.1 在可靠性技术中的应用

贝叶斯方法系统地用于可靠性技术，在20世纪80年代就已有专门的著作．可靠性技术处理的对象一般能做的试验少，数据得来不易，如何利用经验知识来减少试验的数量正是人们所关心的，这就推动了贝叶斯方法在可靠性技术中的应用．

可靠性试验获得的往往是不完全样本，因为试验的时间不可能无限地延续，到

某一时刻必须终止；另一方面样本的分布不是正态的，往往是指数分布、韦布尔(Weibull)分布、极值型分布．下面以二项分布、指数分布为例介绍有关的应用结果，进一步的内容可以参阅专门的著作．

5.1.1 二项分布情形成败型试验

每次试验的成功概率 θ 是一个参数，n 次独立试验中的成功次数 x 服从二项分布，恰好成功 r 次的概率是

$$P(x=r)=\binom{n}{r}\theta^r(1-\theta)^{n-r}.$$

如采用共轭先验分布 $\beta(a,b)$，则 θ 的后验分布是 $\beta(a+r,b+n-r)$．求 θ 的置信区间．这需要用下述定理．

定理 1 设 $\theta\sim\beta(a,b)$，$2a,2b$ 是自然数，则 $\frac{b}{a}\times\frac{\theta}{1-\theta}\sim F(2a,2b)$．

这就可以利用 F 分布来回答上面的问题．设先验分布的超参数 $a=k_0$，$b=k_1$，则当 $x=r$ 时，

$$\frac{n-r+k_1}{r+k_0}\,\frac{\theta}{1-\theta}\sim F(2(r+k_0),2(n-r+k_1)).$$

记 $n_1=2(r+k_0)$，$n_2=2(n-r+k_1)$，$F_\alpha(n_1,n_2)$ 表示自由度为 n_1,n_2 的 F 分布的 α 分位数，则 θ 的置信水平 $1-\alpha$ 的上、下限分别为：

$$\begin{cases}\underline{\theta}_*=\dfrac{n_1F_\alpha(n_1,n_2)}{n_2+n_1F_\alpha(n_1,n_2)},\\[2ex]\overline{\theta}^*=\dfrac{n_1F_{1-\alpha}(n_1,n_2)}{n_2+n_1F_{1-\alpha}(n_1,n_2)}.\end{cases}\tag{5-1}$$

例如，对于某一部件，设从历史资料算得 $k_0=3$，$k_1=2$，目前又进行了 10 次试验，9 次成功，1 次失败，那么成功概率(可靠度)θ 的 0.95 的置信限可计算如下：

已知 $k_0=3$，$k_1=2$，$n=10$，$r=9$，故有 $n_1=24$，$n_2=6$，查 F 表，得

$$F_{0.95}(24,6)=3.84,\quad F_{0.05}(24,6)=1/2.508.$$

将上式代入式(5-1)，得

$$\underline{\theta}_*=0.6146,\quad \overline{\theta}^*=0.9389.$$

5.1.2 指数分布情形

电子产品的使用寿命往往遵从指数分布，它的分布函数

$$F(t)=1-\exp(-\lambda t).$$

$1-F(t)$ 是寿命 ξ 大于 t 的概率．如果希望这个产品在时刻 T 之内不失效，则 $e^{-\lambda T}$ 就是相应的可靠度 R．如何从试验数据中求出 R 的置信限？这是可靠性统计的典型问题．注意到寿命试验往往难以观察到全体试验样品的失效数据，如果只能对于给定的 r 获得前 r 个失效的时刻

$$t_1\leqslant t_2\leqslant\cdots\leqslant t_r,$$

则这类试验称为定数截尾试验，$t_1,t_2,\cdots,t_r$ 就是样本中的前 r 个次序统计量，似然

函数

$$L(\lambda \mid t_1, t_2, \cdots, t_r) = \frac{n!}{(n-r)!} \exp(-t\lambda) \cdot \lambda^r, \tag{5-2}$$

其中

$$t = \sum_{i=1}^{r} t_i + (n-r) t_r .$$

使用不同的先验分布,可以得到不同的后验分布,用杰弗莱原则,可以求出信息量

$$I(\lambda) = \frac{r}{\lambda^2} .$$

于是若先验分布 $\pi(\lambda) \propto 1/\lambda$,则后验分布为

$$h(\lambda \mid t_1, t_2, \cdots, t_r) \propto \lambda^{r-1} \exp(-\lambda t) . \tag{5-3}$$

若采用共轭分布,则相应的先验分布是 $\gamma(a, b)$,即

$$\pi(\lambda) \propto \lambda^{a-1} \exp(-b\lambda),$$

此时,后验分布

$$h(\lambda \mid t_1, t_2, \cdots, t_r) \propto \lambda^{a+r-1} \exp(-\lambda(t+b)) . \tag{5-4}$$

很明显,式(5-3)是式(5-4)的特例,相应于 $a = b = 0$.

从式(5-4)出发,λ 的贝叶斯估计

$$\hat{\lambda} = E\{\lambda \mid t_1, t_2, \cdots, t_r\} = \frac{a+r}{b+t} .$$

注意到 $R = \exp(-\lambda T)$,即 $\ln R = -\lambda T$,它是 λ 的线性函数,很容易求得 R 的后验分布

$$P(R < x \mid t_1, t_2, \cdots, t_r) = P\left(\lambda > -\frac{\ln x}{T} \mid t_1, t_2, \cdots, t_r\right)$$

$$= \int_{-\ln x/T}^{+\infty} \frac{(t+b)^{a+r}}{P(a+r)} \lambda^{a+r-1} \exp(-\lambda(t+b)) \mathrm{d}\lambda .$$

利用这个公式,就可以求出置信限.如果要求 R 的贝叶斯估计,则直接从式(5-4)求 R 的后验期望即可得到

$$\hat{R} = E\{R \mid t_1, t_2, \cdots, t_r\} = \left(\frac{\tau}{1+\tau}\right)^{a+r},$$

其中

$$\tau = \frac{t+b}{T} .$$

τ 的实际意义非常明显,分子 $t+b$ 表示样本能完成的时间 t 和先验信息中能完成任务的时间 b 的总和,分母 T 是任务规定应完成的时间,$\hat{R}$的值在 0 与 1 之间,因为 $\tau > 0, \tau < 1 + \tau$. 如果 τ 很小,即实际完成的与任务要求的相差太远,则可靠度 $\hat{R}$就趋向于 0;如果 τ 很大,即实际完成的大大超过任务规定的,那么 $\hat{R}$就会趋向于 1.

除了上面的两种情形之外,对于双参数的指数分布,同样可以引入共轭分布,但情况复杂得多,后验分布的计算也相当麻烦.对于韦布尔分布,如果对形状参数

有办法估计,就可以化成指数分布来处理．极值型分布也有类似的性质,这里就不逐一介绍了．

5.2 在人工智能中的应用

综合各种信息是人工智能的一个关键问题．贝叶斯方法用于处理信息的综合是有特点的,它在不确定性的推理中提供了一种模式和处理的方法．首先把贝叶斯公式的表达方式稍作改变,只考虑有限个互斥事件．为了简单明了,以两个互逆事件 A 与 $\bar{A}$ 为例．于是,贝叶斯公式可以写成

$$\frac{P(A|B)}{P(\bar{A}|B)}=\frac{P(A)}{P(\bar{A})}\,\frac{P(B|A)}{P(B|\bar{A})}. \tag{5-5}$$

$P(A|B)/P(\bar{A}|B)$ 实际上是后验概率的比值;$P(A)/P(\bar{A})$ 是先验概率的比值;$P(B|A)/P(B|\bar{A})$ 是贝叶斯因子,它反映了由于事件 B 的发生,对先验概率比值应如何调整的部分,也就是事件 B 发生这一信息提供给 A 的有关内容．

如果从信息与概率比值之间的关系来理解式(5-5),原有的信息记为 I_1,事件 B 发生提供的信息记为 I_2,则后验概率是基于 I_1,I_2 这两个独立信息基础上的概率．以 $P(A|I)$ 表示在信息 I 基础上的概率,则式(5-5)就可以改写为如下的形式:

$$\frac{P(A|I_1,I_2)}{P(\bar{A}|I_1,I_2)}=\frac{P(A|I_1)}{P(\bar{A}|I_1)}\,\frac{P(A|I_2)}{P(\bar{A}|I_2)}. \tag{5-6}$$

不难看出,如果信息集 $I_1,I_2,\cdots,I_k$ 相互独立,那么就应有

$$\frac{P(A\mid I_1,I_2,\cdots,I_k)}{P(\bar{A}\mid I_1,I_2,\cdots,I_k)}=\prod_{i=1}^{k}\frac{P(A\mid I_i)}{P(\bar{A}\mid I_i)}. \tag{5-7}$$

如果用 $L(A\mid I)$ 记 $P(A\mid I)/P(\bar{A}\mid I)$,它表示 A 发生的优势,也是统计中常用的似然比,上式就是

$$L(A\mid I_1,\cdots,I_k)=\prod_{i=1}^{k}L(A\mid I_i). \tag{5-8}$$

这样,对于不独立的信息就可表示为条件似然比 $L(A:I_1|I_2)$,它的定义是

$$L(A:I_1|I_2)=\frac{L(A|I_1,I_2)}{L(A|I_2)}.$$

于是

$$\begin{cases}L(A|I_1,I_2)=L(A|I_1)L(A:I_2|I_1),\\ L(A|I_2,I_1)=L(A|I_2)L(A:I_1|I_2).\end{cases}$$

值得注意的是,在人们的认识过程中,信息到来的先后顺序,会对人的信念产生重要印象,“先入为主”就是这一事实的反映．因此,一般说来,$L(A|I_1,I_2)\neq L(A|I_2,I_1)$．这一等式成立的一个充分必要条件正好是关于 $L(A|I)$ 的一个贝叶斯公式:

$$L(A:I_1|I_2)=\frac{L(A|I_1)L(A:I_2|I_1)}{L(A|I_2)}. \tag{5-9}$$

上面这些公式的含义可通过下面一个简单的例子来加以说明,从中可认识到

它们的作用．

一个工厂有两个报警器 I_1, I_2. I_1 响了，事故发生的概率是0.9；I_2 响了，事故发生的概率是0.8，现在两个报警器都响了，问此时工厂发生事故的概率是多少？

这是人工智能中不确定性推理的一个典型问题．设事件 A 表示工厂发生事故．从概率的观点来看，这个问题就是已知两个条件概率 $P(A|I_1)=0.9, P(A|I_2)=0.8$，求 $P(A|I_1,I_2)$．概率论中没有处理过$(X,\mathscr{B})$上两个概率测度 P_1 和 P_2 给定后，如何从 P_1, P_2 去给出$(X,\mathscr{B})$上的另一个概率测度的问题．在统计中通常用的加权平均、取最大值、取最小值等，又都不能合乎人们的直觉认识．直觉认识是两个警报器都响时事故发生的概率应该比每一个报警器单独响时事故发生的概率都要大．式(5-7)能很好地处理这一问题：

$$\frac{P(A|I_1,I_2)}{P(\bar{A}|I_1,I_2)}=\frac{P(A|I_1)}{P(\bar{A}|I_1)}\frac{P(A|I_2)}{P(\bar{A}|I_2)}$$

$$=\frac{0.9}{0.1}\times\frac{0.8}{0.2}=\frac{36}{1}=36.$$

因此，

$$P(A|I_1,I_2)=\frac{36}{37}=0.973>0.9.$$

如果在设计报警器时，已经知道 $P(A|I_1,I_2)=0.95$．那么可以得到（从式(5-9))：

$$L(A:I_1|I_2)=\frac{0.95}{0.8}=1.1875,$$

$$L(A:I_2|I_1)=\frac{0.95}{0.9}=1.0556.$$

实际上，式(5-8)给出了从定性推理到定量推理的一个过渡手段和形式．信息 I_i 提供的 $L(A|I_i)>1$，只是表明 A 发生的可能性较大．如果有 k 个 I_i 都是这样判断，则从式(5-8)就知道：

$$L(A|I_1,I_2,\cdots,I_k)>(1+\epsilon)^k>1+k\epsilon,$$

其中 ϵ 可以是$L(A|I_i)=1+\epsilon_i$ 中最小的那个ϵ_i．这样，从定性的推理就可导出一个定量的推理：

$$P(A|I_1,I_2,\cdots,I_k)>\frac{1+k\epsilon}{2+k\epsilon},$$

当 k 相当大时，它就很接近1．

5.3　在经济研究中的应用

贝叶斯方法在经济领域中的应用，可以参看文献[5]，这是一本著名的著作．这里，只是通过一些例子做一点简单的介绍．经济研究中应用较多的是回归分析和时间序列分析．这些研究既可以探讨经济变量之间的关系，又可以利用这些关系来作预测．下面以回归分析为例，说明贝叶斯方法应用的特点和进展，其内容是20世纪90年代中期的成果．

一般说来，回归的模型可以写成

$$y = X\beta + u. \tag{5-10}$$

现在不假定先验分布是什么，只假定 X 是列满秩的，因此 $(X^TX)^{-1}$ 存在．对式(5-10)两端乘 $(X^TX)^{-1}X^T$ 后，取后验期望(用符号 $\tilde{E}$ 表示)，得到

$$(X^TX)^{-1}X^Ty = \tilde{E}(\beta) + (X^TX)^{-1}X^T\tilde{E}(u).$$

因此，如果假定 $X^T\tilde{E}(u) = 0$，则立即得到 β 的估计为

$$\hat{\beta} = \tilde{E}(\beta) = (X^TX)^{-1}X^Ty.$$

再从式(5-10)两边取后验期望，就有

$$\tilde{E}(u) = y - X\tilde{E}(\beta) = y - X\beta = (I - X(X^TX)^{-1}X^T)y,$$

这就给出了残差的估计 $\hat{u} = \tilde{E}(u) = (I - X(X^TX)^{-1}X^T)y$．为了预测新的 y 值，设它相应的 x 是 x_*，则预测值 $\hat{y}_*$ 应该是

$$\hat{y}_* = \tilde{E}(y_*) = x_*^T\tilde{E}(\beta) = x_*^T\hat{\beta}.$$

它就是通常的回归预测值．

现在来看 β 的后验协方差阵，记作 $\tilde{V}(\beta)$．因为

$$\beta - \tilde{E}(\beta) = -(X^TX)^{-1}X^T(u - \hat{u}).$$

注意到

$$X^T\hat{u} = X^T(I - X(X^TX)^{-1}X^T)y = 0.$$

于是假定 $\tilde{V}(u) = X(X^TX)^{-1}X^T\sigma^2$ 后，就得

$$\tilde{V}(\beta) = (X^TX)^{-1}\sigma^2, \tilde{E}(\sigma^2) = \hat{u}^T\hat{u}/(n-k) \xlongequal{\text{def}} S^2.$$

这样就可以利用最大熵原理给出有关的结论．因为已知后验期望和方差(或协方差阵)，所以熵最大的分布就是正态分布，于是就有：

1° 给定 σ^2 后 β 的后验分布是 $N(\hat{\beta}, \sigma^2(X^TX)^{-1})$；

2° 给定 σ^2 后，对应于 x_* 的预测值 y_* 的分布是 $N(\hat{y}_*, \sigma^2(1 + x_*^T(x^Tx)^{-1}x_*))$；

3° σ^2 的后验期望估计 $\hat{\sigma}^2 = \tilde{E}(\sigma^2) = S^2$，且具有指数分布密度

$$h(\sigma^2 | y) = (\frac{1}{S^2})\exp(-\frac{\sigma^2}{S^2}), \sigma^2 > 0;$$

4° β 与 σ^2 的联合后验密度是

$$N(\beta | \hat{\beta}, \sigma^2(X^TX)^{-1})h(\sigma^2 | y).$$

这一种处理问题的方法对于考虑一般的统计问题是很有启发的．可以从观察值与参数之间的关系出发，先求后验期望与协方差阵，然后用已知后验期望、方差的最大熵分布——正态分布来处理．这已成了一个一般性的模式，非常方便．

5.4 其他应用

贝叶斯分析方法的应用范围是广泛的,不仅与统计、与先验信息有关的领域会用到它,就是与统计无关的决策问题、与先验信息无关的一些实际问题也会用上它,所以要穷举各种用法是做不到的,从金融、保险到神经网络、混沌学说,都可以见到应用贝叶斯方法的文章和著作.这里用一些例子来作一点说明.

例1 有轨电车总数的估计.

杰弗莱在他的著作中(见文献[2])提出了这样的问题:一个人在国外的一个城中旅游,他对城市的大小毫无所知,看了一个有轨电车的号码是100,那么,他对这个城市有轨电车总数的估计会是多少?最保守的估计是1.

考虑这个问题时,设想总数是 N,观察到的号码是 T,于是 $p(t|N)=P(T=t|N)=\frac{1}{N}$, $t=1,2,\cdots,N$. 注意 N 的取值是全体自然数,与$(0,\infty)$上先验分布在无信息情况下是 $1/\sigma(\sigma>0)$相仿,此时先验分布是

$$\pi(N)\propto\frac{1}{N}\qquad(N=1,2,\cdots).$$

因此后验分布

$$h(N|T)\propto\frac{I_{(N\geqslant T)}}{N^2},$$

其中 $I_{(N\geqslant T)}$是一示性函数,当 $N\geqslant T$ 时为1,否则为0. 这就得到后验概率,对于 $n_0\geqslant T$,有

$$P(N\geqslant n_0\mid T)=\frac{\sum\limits_{k=n_0}^{\infty}\frac{1}{k^2}}{\sum\limits_{k=T}^{\infty}\frac{1}{k^2}}.$$

此时,后验分布的中位数近似为 $2T$,这就是用贝叶斯方法估计的有轨电车总数.

值得注意的是,看到一个标号为100的样本,用经典学派的方法,无法得到多于100的估计值.注意到这一问题与一些偶然事故、灾害性事件发生的概率有相似之处,所以处理这一问题的方法也是值得借鉴的.

例2 捕获—再捕获的调查数据分析

某一地区的野生鹿群总数 N 是未知的,想了解 N 的大小,需进行捕获—标记放回—再捕获的抽样调查.假定两次捕捉间总数 N 没有变化,每个个体被捕获的概率都是同一个值 p,则可得到如表5-1所示的数据.

表 5-1

		第二次捕捉		
		被捕	未捕	合计
第一次捕捉	被捕	n_{11}	n_{12}	n_1
	未捕	n_{21}	$(n_{22}?)$	
	合计	$n_{\cdot 1}$		

第一次捕获总数为 $n_{1\cdot}$，其中 n_{11}个第二次又被捕获，n_{12}个未被捕获，第二次新捕获的是 n_{21}个，总数是 $n_{\cdot 1}$. 于是似然函数可以写成

$$L(N,p\mid n_{11},n_{12},n_{21})=\begin{pmatrix} & N & \\ n_{11} & n_{12} & n_{21}\end{pmatrix}p^{n}(1-p)^{2N-n},$$

其中 $n=2n_{11}+n_{12}+n_{21}$是总的捕获数；

$$\begin{pmatrix} & N & \\ n_{11} & n_{12} & n_{21}\end{pmatrix}=\frac{N!}{n_{11}!\ n_{12}!\ n_{21}!\ (N-n_{11}-n_{12}-n_{21})!}$$

是多项系数. 先验分布

$$\pi(N,p)=\pi(N)\pi(p),$$

其中 $\pi(p)$是 $\beta(a,b)$；$\pi(N)\propto 1$，$\pi(N,p)$是自然数上的均匀分布. 这样就得到后验分布

$$h(p\mid N,n)=\beta(a+n,b+2N-n),$$

$$\pi(N\mid n)\propto\frac{\begin{pmatrix}N\\n_+\end{pmatrix}B(a+n,b+2N-n)}{\beta(a,b)},$$

其中 $n_+=n_{11}+n_{12}+n_{21}$是捕获的不同个体总数.

要直接计算上述后验分布的期望和其他的统计特征数是困难的，但可以采取近似方法，包括前面提到过的吉布斯抽样来求取，这可以得到较好的结果. 与这种方法相对比，经典方法把 $n_{1\cdot}$，$n_{\cdot 1}$看成固定的值，n_{11}是唯一的随机变量，于是，得到 N 的最大似然估计为

$$\widehat{N}=\frac{n_{1\cdot}}{(n_{11}/n_{\cdot 1})}=\frac{n_{1\cdot}n_{\cdot 1}}{n_{11}}.$$

很明显，当 $n_{11}=0$ 时，$\widehat{N}$就无法应用. 贝叶斯方法就不会出现这类问题.

这个例子中的方法在 20 世纪 80 年代被成功地用于美国历史上一些重要文件的著作权的识别，取得了很好的效果.

参考文献

1 (美)Press S J. 贝叶斯统计学——原理、模型及应用. 廖文，陈安贵等译. 北京：中国统计出版社，1992.

2 Jeffreys H. Theory of probability. 3rd edition. Oxford: Clarendon Press. 1961.
3 Berger J O. Statistical decision theory and Bayesian analysis. 2nd edition. New York: Springer-Verlay, 1985.
4 Robert C P. The Bayesian choice. New York: Springer-Verlag 1994.
5 Zellner A. An introduction to Bayesion inference in econometrics. New York: John Wiley, 1971.

·随机数学卷·

第9篇

稳健统计

编　者　李国英
审校者　陈希孺

目　　录

引　言

稳健统计研究具有稳健性的统计方法，即当观测数据符合假定模型，甚至与假定模型有偏离时，性质都较好或至少性质不会很坏的统计方法.

尽管早在18世纪就出现了最简单、直观的稳健统计方法，但直到20世纪50年代前后基于正态分布理论的统计方法的不稳健性才引起统计学家的广泛注意. 尤伯(P.J.Huber)于1964年创立的渐近极小极大理论，以及汉甫(F.R.Hampel)于20世纪60年代末提出的崩溃点等概念和有界影响方法奠定了稳健统计的理论基础. 其后，稳健检验、多元位置和散布阵的多种稳健估计、线性回归的M估计、有界影响估计，以及高崩溃点高效率估计等许多方法和理论相继提出和建立，这不仅使稳健统计日臻完善，而且为统计诊断提供了更可靠的工具.

由于观测数据偏离假定模型是普遍存在的问题，因此，稳健统计方法已被广泛应用于经济、金融、气象、环境、生物、医学、地质勘探、图像和信号处理等等许多领域的建模、预测、推断和数据分析.

1　稳健性概念

1.1　概　述

1.1.1　数据、模型和统计方法

统计学在我国常被称为数理统计学，它主要是研究怎样有效地获取、分析和解释数据，如何从数据中提取信息、寻找规律的方法和理论. 它是人们进行推断、决策和预测的重要工具. 数据并非来自数学或统计学，而是对客观事物进行观测、试验或调查得到的. 几乎所有的实际部门和研究领域都有大量的问题需要通过分析和研究数据来解决，因此统计学是应用性和交叉性非常强的学科.

统计学提供了丰富的分析数据的方法，这些方法在数据满足一定的基本假设(即统计模型)的条件下具有优良的性质，其中有许多方法在某准则下还是最优的. 应用统计方法分析实际数据时需要考虑两个问题：第一，数据与所用方法背后的统计模型(以下称之为假定模型)是否一致；第二，当数据偏离假定模型时该方法是否还具有优良性.

大量的实践表明，数据与假定模型一致的情况很少. 首先，实际中的数据一般都不那么"干净"，因为在数据的观测、记录、整理和传送的过程中，难免出现这样那样的错误，使数据中或多或少地含有一些与所研究的问题无关的数值，这称之为

"过失值".经验表明数据中一般含有1% ~ 10% 的过失值.其次,统计模型一般是一些经过简化的、统计上能够处理的假定模型.然而实际问题往往是复杂的,即使是"干净"的数据,一般也很难用一个相对简单的统计模型准确描述,也就是说模型只能是对实际问题的近似描述.遗憾的是,许多在假定模型下最优的统计方法,当数据偏离假定模型时就不再是最优的了,有的还会变得很差,甚至可能导致不合理的分析结果.

1.1.2 偏离正态分布时的样本均值

样本均值是使用最多的一个统计量,而且统计理论早已证明,当数据是来自正态分布的独立同分布样本时,样本均值在多种准则下都是总体期望的最优估计.如果数据偏离了正态模型会怎样呢?先看一下下面的例子.

表 1-1 给出了某新品种的十头子猪在出生后第一周所增加的体重,现欲估计该品种新生子猪第一周的增重.

表 1-1

序号 i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
增重 X_i/kg	1.70	1.60	1.45	1.50	1.90	1.20	18.0	1.40	1.75	1.50

对于称重一类的测量数据,一般都用正态分布来描述,即可假定 $X_1, X_2, \cdots, X_{10} \overset{\text{iid}}{\sim} N(\mu, \sigma^2)$(即诸 X_i 独立同分布,其分布是期望为 μ、方差为 σ^2 的正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$).现要求期望 μ 的估计,这自然就会用最优估计——样本均值 $\bar{X}$ 来估计它.但也有另一个可以考虑的估计,这就是样本中位数 $m_X \overset{\text{def}}{=} \text{med}(X_1, X_2, \cdots, X_{10})$.若记 $X_{(1)} \leqslant X_{(2)} \leqslant \cdots \leqslant X_{(n)}$ 为 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的次序统计量,则

$$m_X = \text{med}(X_i) = \begin{cases} X_{(m)} & (m = (n+1)/2, n \text{ 为奇数}), \\ \dfrac{1}{2}(X_{(m)} + X_{(m+1)}) & (m = n/2, n \text{ 是偶数}). \end{cases}$$

这两种方法计算的结果分别是 $\bar{X} = 3.2$, $m_X = 1.55$.

二者哪个好呢?对于这一简单情况,根据常识可以判断 $X_7 = 18.0$ 不合理,很可能是小数点放错了所致;并且由于它的出现造成了 $\bar{X}$ 过大,不切实际.如果把 X_7 去掉,用其余九个观测值重新计算,则有

$$\bar{X}' = 1.56, \qquad m'_X = 1.50.$$

这两个估计值与上面的 $m_X = 1.55$ 都较接近,也比较可信.这就是说,由于该组数据中含有一个远离数据群体的过失值,即**离群值**,从而偏离了正态总体.这时,样本均值就失去了其优良性.下面从理论上作进一步的分析.

对于含有过失值的数据,尤伯(1981)等人用"污染"模型来描述它.记 $\Phi(X)$ 为标准正态分布函数,**污染模型**是形如

$$F(X-\theta) = (1-\varepsilon)\Phi\left(\frac{X-\theta}{\sigma}\right) + \varepsilon H(X)$$

的分布,其中 $H(X)$ 是一个重尾(即 $|X|$ 大的概率比正态分布下的大)的分布函

数,直观上可以将 ε 解释为过失值的比例.

现以 $\sigma=1, H(X)=\Phi(\frac{X-\theta}{\tau}), \tau>1$ 为例.这时样本均值和样本中位数都是 θ 的无偏估计,而且

$$\sqrt{n}(\bar{X}-\theta) \xrightarrow{\text{d.}} N(0,V_1), \quad \sqrt{n}(m_X-\theta) \xrightarrow{\text{d.}} N(0,V_2),$$

$$V_1 = 1+(\tau^2-1)\varepsilon, \quad V_2 = \frac{\pi}{2}(1+(\tau^{-1}-1)\varepsilon)^{-2}, \tag{1-1}$$

其中 $\xrightarrow{\text{d.}}$ 表示依分布收敛.样本中位数对于样本均值的渐近相对效率为

$$e = e(m_X,\bar{X}) = V_1/V_2,$$

当 $\tau=4$ 时有如表 1-2 所示的数值结果.

表 1-2

ε	0.000	0.025	0.050	0.100	0.150	0.200
V_1	1.000	1.375	1.750	2.500	3.250	4.000
V_2	1.571	1.631	1.695	1.835	1.985	2.174
$e=V_1/V_2$	0.637	0.843	1.033	1.362	1.637	1.840

可见,当过失值比例为 5 % 时,样本均值的渐近方差就大于样本中位数的渐近方差了;当过失值比例为 10 % 时,样本均值的估计效果更差;当过失值比例增加时,样本均值的渐近方差变化较大,而样本中位数的渐近方差变化较小.由式(1-1)可知,对于任何 $\varepsilon>0$,当 $\tau\to\infty$ 时,$V_1\to\infty$,$V_2\to\frac{\pi}{2}(1-\varepsilon)^{-2}$,$e\to 0$.这表明,当 $H(X)$ 的尾部很重(这时有较大可能出现离群值)时,样本均值的估计效果会变得很差.

1.1.3 稳健性和稳健性统计浅释

由于数据中常含有过失值等,因此,数据常会偏离惯用的假定模型,由这种情况所带来的统计问题在 20 世纪 50、60 年代中引发了一些新的统计分支,稳健统计就是其中之一,它解决这类问题的基本途径是使用具有稳健性的统计方法.

简单地说,**稳健性**是指统计方法的性质关于统计模型的稳定性.例如,从上一小节的讨论可以看出,样本均值并不稳健,而样本中位数对统计模型的变化不大敏感,它比样本均值稳健得多.由于数据与假定模型总有或多或少的差距,因此,自然希望所用的统计方法应具有以下性质:

1° 当假定模型正确时,该方法具有良好的性质;

2° 当数据与假定模型相差较小时,该方法的性质变化不大,是比较好的;

3° 当数据与假定模型相差较大时,该方法的性质不会太坏,仍然是可用的.

稳健统计的任务就是研究和寻找这样的统计方法.到目前为止,研究较多的是关于总体分布的稳健性,特别是关于数据中含有过失值这种偏离时的稳健性.近半个世纪以来,稳健统计从产生到发展,已经有了丰富的理论结果,给出了许多各种

各样的稳健方法.但总的来说,"稳健性"还不能算是一个有严格数学定义的概念,而是人们希望的统计方法应具备的一种性质,即希望由于各种不可避免的原因,当关于数据的假定模型不能完全成立时,仍然能给出有意义的分析结果.

由于客观世界中的数据千奇百怪,统计模型也是多种多样,而且还在不断发展,稳健统计已经解决的还只是一部分问题,而且还永远会有新问题产生,因此,在这个意义上说,除了研究和提供具有稳健性的统计方法以外,稳健统计还应该是一种思想,即应用统计方法时,应该根据实际问题和数据情况,充分考虑到数据对假定模型可能出现的偏离,当出现偏离时所用的统计方法可能出现的问题,以及可能采取的措施.

1.2 稳健性的数学描述

1.2.1 统计泛函与统计量

许多常用的统计量都可以表示为经验分布的泛函.例如,设 $X_1,X_2,\cdots,X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} F$,$F$ 是分布函数,F_n 是相应的经验分布(即在每个 X_i 处有概率 $1/n$ 的分布),则样本均值可以表示为

$$\bar{X} = T(F_n) = \int x\mathrm{d}F_n, \tag{1-2}$$

其中 $T(F_n)$ 为统计泛函.

泛函 T 的定义域可以扩大到 $\{G: G$ 是分布,$\int x\mathrm{d}G < \infty\}$ 上,$T(G) = \int x\mathrm{d}G$ 是分布 G 的期望,称之为样本均值的统计泛函.又如,样本中位数的统计泛函是 $T(F) = F^{-1}(\frac{1}{2})$,它是分布函数的中位数,其定义域是 $\{G: G$ 是分布函数,其中位数唯一$\}$.更一般地,统计泛涵是定义在分布函数空间或其子集上的泛函.统计泛函 T 在经验分布处的值 $T(F_n)$ 就是一个统计量.

统计泛函也可以用泛函方程来定义.例如,设 $f(x,\theta)$ 是密度函数,其分布函数是 $F(x,\theta)$,则 θ 的极大似然估计的统计泛函 $T(F)$ 由方程

$$\int \ln f(x,T(F))\mathrm{d}F(x,T(F)) = \max_{\theta}\int \ln f(x,\theta)\mathrm{d}F(x,\theta)$$

来定义.如 $f(x,\theta)$ 满足一定的正则条件,则 $T(F)$ 也可以由方程

$$\int \frac{\partial \ln f(x,\theta)}{\partial \theta}\mathrm{d}F(x,\theta) = 0$$

的解 $\theta^* \overset{\text{def}}{=\!=\!=} T(F)$ 来定义.

相合性是统计量的一个基本性质,对于用经验分布泛函表示的统计量来说,相合性即是 $T(F_n) \to T(F)(n \to \infty)$.

当然,不是所有的统计量都可以用统计泛函来表示的.例如,记 $X_{(1)}$ 和 $X_{(n)}$ 分别是样本 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 的最小和最大的次序统计量,则极差 $R = X_{(n)} - X_{(1)}$ 就不能用经验分布的泛函来表示.

1.2.2 定性稳健性

定性稳健性描述"数据的分布模型变化较小时,统计量的性质变化也较小"这一性质.

设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 是 p 维的独立同分布样本, $T_n = T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 是 k 维统计量. 记 $X_i \sim F$ 时 T_n 的分布为 $\mathscr{L}_F(T_n)$, $\mathscr{M}_d$ 为 d 维分布函数空间,则 T_n 同时也决定了一个由 $\mathscr{M}_p$ 到 $\mathscr{M}_k$ 的映像 $\tilde{T}_n(F) = \mathscr{L}_F(T_n)$. 如果映像序列 $\{\tilde{T}_n\}$ 在 F_0 处是关于 n 等度弱连续的,则统计量序列 $\{T_n\}$ 叫做在 F_0 处定性稳健.

该定义虽然直观,但不好验证. 下面的定理为用统计泛函表示的统计量提供了一个简便的验证方法。

定理 1 设 p 维样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 独立同分布, F_n 是相应的经验分布, T 是 $\mathscr{M}_p$ 上取值于 $\mathbf{R}^k$ 的泛函, $T_n = T(F_n)$.

(1) 若泛函 T 在 F_0 处弱连续,则 $\{T_n\}$ 在 F_0 处弱相合、且在 F_0 处定性稳健;

(2) 若 $\{T_n\}$ 在 F_0 处定性稳健,且在 F_0 的一个邻域中弱相合,则 T 泛函在 F_0 处弱连续.

定性稳健是稳健性的一个起码要求,然而,一些常用的统计量,例如样本均值、样本方差、t 统计量等,都不是定性稳健的. 相反,如果 F 的中位数唯一,则样本中位数在 F 处定性稳健.

1.2.3 影响函数

影响函数描述在样本空间中每一点处的过失值对统计量的影响. 用 $\delta(x)$ 表示以概率为 1 取值 x 的蜕化分布,若统计量 $T_n = T(F_n)$ 在 F_0 处相合,则 $\{T_n\}$ 在 F_0 处的影响函数定义为

$$\mathrm{IF}(x, T, F_0) = \lim_{\varepsilon \to 0}\left(\frac{T((1-\varepsilon)F_0 + \varepsilon\delta(x)) - T(F_0)}{\varepsilon}\right). \tag{1-3}$$

影响函数有界是稳健性的一种表现,因此称

$$\gamma^* = \gamma^*(T, F_0) = \sup_x |\mathrm{IF}(x, T, F_0)|$$

为过失敏感度,其中 $|\cdot|$ 表示向量的欧氏模,当 T 是实值泛函时就是绝对值. 若 $\gamma^*(T, F_0) < \infty$,则称统计量 $\{T_n\}$ 在 F_0 处 **B 稳健**.

样本均值的影响函数无界,不是 B 稳健的;样本中位数的影响函数有界,是 B 稳健的(见本篇 2.1.2 小节).

影响函数是用统计泛函定义的. 图戈伊(J.W.Tukey) 直接考虑单个过失值对统计量 $T_n = T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 的影响,定义了敏感度曲线

$$\mathrm{SC}(x_j, X_1, X_2, \cdots, X_n) = n(T_n(X_1, X_2, \cdots, X_{n-1}, x) - T_{n-1}(X_1, X_2, \cdots, X_{n-1})).$$

1.2.4 崩溃点

崩溃点有统计泛函形式和样本形式两类,分别称为渐近崩溃点("渐近"二字

常被省去）和样本崩溃点.

1. 渐近崩溃点

渐近崩溃点反映统计泛函所能承受的实际分布对假定分布的偏离程度. 通常用污染"邻域"来描述由过失值引起的总体分布的偏离. 分布函数集合

$$\mathscr{P}_\varepsilon(F_0) \xlongequal{\text{def}} \{(1-\varepsilon)F_0 + \varepsilon H: H\text{为任一分布}\}$$

被称为 F_0 的 ε 污染"邻域"（也叫 ε 过失"邻域"，这不是拓扑意义下的邻域）. 统计量 $T_n = T(F_n)$ 在 F_0 处的（渐近）崩溃点定义为

$$\varepsilon^* = \varepsilon^*(T, F_0) = \sup\{\varepsilon > 0: \sup_{F \in \mathscr{P}_\varepsilon(F_0)} |T(F) - T(F_0)| < \infty\}.$$

如 F_0 是假定分布，则当 $\varepsilon < \varepsilon^*$ 时，对于 $F \in \mathscr{P}_\varepsilon(F_0)$，均有 $|T(F)| < \infty$，T 仍可以用；当 $\varepsilon > \varepsilon^*$ 时，存在 $\widetilde{F}_n \in \mathscr{P}_\varepsilon(F_0)$ 使 $|T(\widetilde{F}_n)| \to \infty$，这时 T 就不能用了.

上述的是关于污染邻域的崩溃点. 也可以用其他邻域来描述总体分布的偏离，例如用莱维(P.Levy)邻域等定义相应的崩溃点（参见文献[2]）.

2. 样本崩溃点

样本崩溃点是指直接从数据出发，考虑统计量所能承受的过失值的比例. 它有三种类型：添加型、替换型和简化替换型.

给定样本 $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \cdots, X_n)$，$T_n = T_n(\boldsymbol{X})$ 是统计量. 记 $\boldsymbol{X}_k = (X_1, X_2, \cdots, X_k)(k \leqslant n)$，$\boldsymbol{X}_k$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的前 k 个元素. 对于 $\boldsymbol{Y} = (y_1, y_2, \cdots, y_s)$，$\boldsymbol{Z} = (z_1, z_2, \cdots, z_t)$，令

$$\boldsymbol{Y} \cup \boldsymbol{Z} = (y_1, y_2, \cdots, y_s, z_1, z_2, \cdots, z_t).$$

当 $s = t$ 时，记 $\boldsymbol{Y} \cap \boldsymbol{Z}$ 是 $\boldsymbol{Y}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 作为有序集合的交，即 $\boldsymbol{Y} \cap \boldsymbol{Z} = (y_{i_1}, y_{i_2}, \cdots, y_{i_k})$ 若 $y_{i_l} = z_{i_l}(l = 1, 2, \cdots, k)$，且 $y_j \neq z_j, \forall j \in \{i_1, i_2, \cdots, i_k\}$，则 T_n（在样本 $\boldsymbol{X}$ 处）的添加型样本崩溃点定义为

$$\hat{\varepsilon}_A = \hat{\varepsilon}_A(T_n, \boldsymbol{X}) = \min\{\frac{k}{n+k}: \sup_{\boldsymbol{Y} \in \mathbf{R}^k} |T_{n+k}(\boldsymbol{X} \cup \boldsymbol{Y}) - T_n(\boldsymbol{X})| = \infty\};$$

T_n（在样本 $\boldsymbol{X}$ 处）的替换型样本崩溃点定义为

$$\hat{\varepsilon}_R = \hat{\varepsilon}_R(T_n, \boldsymbol{X}) = \min\{\frac{k}{n}: \sup_{\substack{\boldsymbol{Y} \in \mathbf{R}^n \\ \boldsymbol{Y} \cap \boldsymbol{X} \in \mathbf{R}^{n-k}}} |T_n(\boldsymbol{Y}) - T_n(\boldsymbol{X})| = \infty\}.$$

由于替换型样本崩溃点有时很难计算，故定义简化替换型样本崩溃点为

$$\hat{\varepsilon}_{SR} = \hat{\varepsilon}_{SR}(T_n, \boldsymbol{X}) = \min\{\frac{k}{n}: \sup_{\boldsymbol{Y} \in \mathbf{R}^k} |T_n(\boldsymbol{X}_{n-k} \cup \boldsymbol{Y}) - T_n(\boldsymbol{X})| = \infty\}.$$

上述定义都是为保持统计泛函和统计量的值有穷这一性质而设定的. 有些统计量可能还需要保持其他方面的性质，因此也可以定义其他意义的崩溃点（参见文献[5]）.

崩溃点为正值是稳健性的重要方面. 具有高崩溃点的统计方法在进行探索性数据分析时更有实用价值.

当然，统计方法仅具有稳健性是不够的，还必须具有其他好的性质，而且对于同一类统计问题，稳健的统计方法有很多，因此，需要把其稳健性与其他性质结合起来考虑，从稳健方法中找出好的或"最优"的方法.

1.3 优良性准则

1.3.1 极小化极大准则

尤伯把稳健性与统计方法的某基本性质结合,提出了极小化极大准则,又称为尤伯准则,即在一类稳健方法中寻找一种能使统计量在假定分布附近的一个分布函数集合(例如 ϵ 污染邻域)上的最差性质达到最好的方法.例如,假定满足一定条件的位置 M 估计类 $\mathscr{T}$ 是估计位置参数的一类稳健估计,假定分布是 F_0,$\mathscr{G}_\epsilon = \mathscr{G}_\epsilon(F_0)$ 是 F_0 的污染邻域,考虑的统计性质是估计的渐近方差,尤伯的极小化极大准则就是要找一个 M 估计 $T_0 \in \mathscr{T}$ 使得它在 F_0 的污染邻域 $\mathscr{G}_\epsilon$ 中的最大渐近方差是所有 $T \in \mathscr{T}$ 在 $\mathscr{G}_\epsilon$ 中的最大渐近方差的最小值,即若记 $V(T,F)$ 是当总体分布为 F 时 T 的渐近方差.则上述 T_0 满足

$$\sup_{F\in\mathscr{G}_\epsilon} V(T_0,F) = \inf_{T\in\mathscr{T}}\sup_{F\in\mathscr{G}_\epsilon} V(T,F).$$

1.3.2 假定模型下最优的准则

汉甫提出了另一个优良性准则.他用影响函数有界作为稳健性的要求,将之与统计方法在假定模型下的性质结合起来,在过失敏感度不超过给定常数的统计方法中寻找在假定分布下某性质最优的方法,这一准则称为假定模型下最优准则,又称为汉甫准则.例如,若过失敏感度 $\gamma^* \leqslant c$ 的某位置估计类为 $\mathscr{T}_c$,假定模型为 G,要考虑的统计性质为估计的渐近方差,则汉甫准则是要在 $\mathscr{T}_c$ 中找出在 G 处的渐近方差达到最小的估计.

一般地说,要在上面两个准则下找到最优解是相当困难的,目前只对一些比较简单的统计问题找到了答案,而且对一些较复杂的问题,即使能按上述准则找到"最优"方法,这些方法在某方面的稳健性也不那么好(参见本篇 3.1.2 小节).

总之,稳健统计(实际上其他统计分支也一样)的研究不能拘泥于某种优良性准则,重要的是根据实际问题的需要,选择尽可能好的统计方法.构造具有实际需要的稳健性和其他好性质的统计方法是稳健统计的重要内容.

2 位置与刻度估计

2.1 位置估计

2.1.1 位置泛函和位置参数

设 $F_0 \in \mathscr{M}_p$(p 维分布函数空间),分布族 $\{F_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\theta}):\boldsymbol{\theta}\in \mathbf{R}^p\}$ 是(由 F_0 生成

的)位移分布族.通常把分布族中的参数 $\boldsymbol{\theta}$ 作为位置参数.其实可以用许多不同的量来描述分布的"位置".

设 $\mathscr{F}\subset\mathscr{M}_p$,定义在 $\mathscr{F}$ 上取值于 $\mathbf{R}^p$ 的泛函 $\boldsymbol{T}$ 叫做位置泛函.如果它具有位移同变性,即对于任何 $F\in\mathscr{F}$ 和 $\boldsymbol{a}\in\mathbf{R}^p$,有 $\boldsymbol{T}(F(\cdot-\boldsymbol{a}))=\boldsymbol{T}(F)+\boldsymbol{a}$.这时称 $\boldsymbol{T}(F)$ 为 F 的位置参数(注:当 $\boldsymbol{X}\sim F(\cdot)$ 时,$\boldsymbol{X}+\boldsymbol{a}\sim F(\cdot-\boldsymbol{a})$).根据上述定义,有如下定理.

定理 1 设 $F_0\in\mathscr{M}_p$,则 $\mathscr{F}=\{F_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\theta}):\boldsymbol{\theta}\in\mathbf{R}^p\}$,并有

1° 由 $\boldsymbol{T}[F(\cdot-\boldsymbol{\theta})]=\boldsymbol{\theta}$ 定义的 $\boldsymbol{T}$ 是 $\mathscr{F}$ 上的位置泛函;

2° 对于任何定义在 $\mathscr{F}$ 上的位置泛函 $\boldsymbol{T}$,存在 $G\in\mathscr{F}$ 使对于任何 $F\in\mathscr{F}$,有

$$F(x)=G(x-T(F));$$

3° 如 $\boldsymbol{T}_1$ 和 $\boldsymbol{T}_2$ 均是 $\mathscr{F}$ 上的位置泛函,则 $\boldsymbol{T}_1(F)-\boldsymbol{T}_2(F)$ 在 $\mathscr{F}$ 上是与 F 无关的常数向量.

该定理表明:由位置泛函定义的位置参数与通常的位置参数是一致的;分布的位置可以用不同的位置泛函描述.问题是如何选择具有良好性质的位置泛函?

有些分布的位置有其特定的含义,例如对称中心.对于 p 维随机向量 $\boldsymbol{X}$,如果存在 $\boldsymbol{\mu}\in\mathbf{R}^p$,使得 $\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{X}$ 有相同的分布(记为 $\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu}\overset{\text{d.}}{=\!=}\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{X}$),则称 $\boldsymbol{X}$ 关于 $\boldsymbol{\mu}$ 中心对称,$\boldsymbol{\mu}$ 称为 $\boldsymbol{X}$ 的(对称)中心.这时用对称中心来代表 $\boldsymbol{X}$ 的位置更为适合.如果对于任何关于原点中心对称的分布 F,有 $\boldsymbol{T}(F)=0$,则位置泛函 $\boldsymbol{T}$ 称为中心位置泛函.易知,如果 F_0 关于原点中心对称,$\mathscr{F}=\{F_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\theta}):\boldsymbol{\theta}\in\mathbf{R}^p\}$,$\boldsymbol{T}$ 是中心位置泛函,则对于任何 $F_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x})=F_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\theta})$,有 $\boldsymbol{T}(F_{\boldsymbol{\theta}})=\boldsymbol{\theta}$.

常见的位置泛函有:一维分布的 α 分位数 $F^{-1}(\alpha)(0<\alpha<1)$ 是位置泛函;中位数 $\mathrm{med}(F)$ 是中心位置泛函;p 维分布的期望 $\int\boldsymbol{x}\mathrm{d}F$ 是中心位置泛函.它们都可以作为分布的位置参数.

如1.2.1小节所述,若 F_n 是 p 维由样本 $\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_n$ 决定的经验分布,$\boldsymbol{T}$ 是位置泛函,则 $\boldsymbol{T}_n=\boldsymbol{T}_n(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_n)\overset{\text{def}}{=\!=}\boldsymbol{T}(F_n)$ 是位置参数 $\boldsymbol{T}(F)$ 的估计.易知 $\boldsymbol{T}_n$ 有位移同变性,即对于任意 $\boldsymbol{a}\in\mathbf{R}^p$,

$$\boldsymbol{T}_n(\boldsymbol{X}_1+\boldsymbol{a},\boldsymbol{X}_2+\boldsymbol{a},\cdots,\boldsymbol{X}_n+\boldsymbol{a})=\boldsymbol{T}_n(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_n)+\boldsymbol{a}.$$

2.1.2 M 估计及其性质

M 估计是"极大似然型估计"的简称,由尤伯最早提出.

定义 1 设 ρ 是 $\mathbf{R}$ 上的实值函数,$X_1,X_2,\cdots,X_n$ 是一维样本,则**位置 M 估计**定义为极小化问题

$$\sum_{i=1}^{n}\rho(X_i-T_n)=\min_t\sum_{i=1}^{n}\rho(x_i-t) \tag{2-1}$$

的解 $T_n=T_n(X_1,X_2,\cdots,X_n)$.M 估计的另一形式是定义为

$$\sum_{i=1}^{n}\psi(X_i-t)=0 \tag{2-2}$$

的根. 当 ρ 为可导凸函数, $\psi = \rho'$(ρ 的导数) 时,定义式(2-1) 与式(2-2) 等价.

样本均值和样本中位数都属于 M 估计. 常用的 M 估计及相应的 ρ 和 ψ 函数如表 2-1 所示,其中 $\mathrm{sgn}t$ 是符号函数,即

$$\mathrm{sgn}t = \begin{cases} 1 & (当\ t > 0), \\ 0 & (当\ t = 0), \\ -1 & (当\ t < 0); \end{cases}$$

K 和 B 是常数,通常取 $1 \leqslant K \leqslant 2$, $4 \leqslant B \leqslant 6$.

表 2-1

估计量	$\rho(t)$	$\psi(t)$
样本均值 (LS 估计)	$t^2/2$	t
样本中位数 (L_1 估计)	$\lvert t\rvert$	$\mathrm{sgn}t$
尤伯 M 估计	$\begin{cases} t^2/2 & \lvert t\rvert \leqslant K \\ K\lvert t\rvert - K^2/2 & \lvert t\rvert > K \end{cases}$	$\begin{cases} t & \lvert t\rvert \leqslant K \\ K\mathrm{sgn}t & \lvert t\rvert > K \end{cases}$
图戈伊 M 估计	$\begin{cases} \dfrac{B^2}{6}\left(1 - \left(1 - \left(\dfrac{t}{B}\right)^2\right)^3\right) & \lvert t\rvert \leqslant B \\ B^2/6 & \lvert t\rvert > B \end{cases}$	$\begin{cases} t(1 - (t/B)^2)^2 & \lvert t\rvert \leqslant B \\ 0 & \lvert t\rvert > B \end{cases}$

由式(2-1) 定义的 M 估计的统计泛函 $T(F)$ 是

$$\min_t \int \rho(x - t)\mathrm{d}F(x) = 0 \tag{2-3}$$

的解. 为了避免上式左边积分出现无穷的情况,常将之改写成等价的极小化问题:

$$\min_t \int (\rho(x - t) - \rho(x - t_0))\,\mathrm{d}F(x),$$

其中 t_0 是某已知的实数. 由式(2-2) 定义的 M 估计的统计泛函 $T(F)$ 为

$$\int \psi(x - t)\mathrm{d}F(x) = 0 \tag{2-4}$$

的根.

实际应用中一般使用定义式(2-2) 和式(2-4), 下面将主要考虑由式(2-2) 定义的位置 M 估计 T_n 和由式(2-4) 定义的位置 M 泛函 T.

命题 1 由式(2-4) 定义的泛函 $T(F)$ 是位置泛函; 当 ψ 是奇函数(即 $\psi(-t) = -\psi(t)$) 时, $T(F)$ 是中心位置泛函.

对实际中使用的位置 M 估计来说,其 ψ 函数都是奇函数.

M 估计具有如下性质:

1° 渐近性质 在相当弱的条件下就可以得到位置 M 估计的相合性和渐近正态性. 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} F$, T_n 是由式(2-2) 定义的位置 M 估计,记

$$\lambda(t) = \lambda(t, F) = \int \psi(x - t) \mathrm{d}F(x),$$

则有如下定理.

定理 2 (相合性)　在上述记号下,如 ψ 是非降函数,$\lambda(t) = 0$ 的根存在且唯一,记为 $T(F)$,又 λ 函数在 $T(F)$ 的一个邻域中有穷,则 M 估计(序列)$\{T_n\}$ 是强相合的,即以概率 1 有 $T_n \to T(F)(n \to \infty)$.

定理 3 (渐近正态性)　设定理 2 中的条件成立,又设存在 $T(F)$ 的一个邻域 $\mathscr{U}$,使 λ 函数在 $\mathscr{U}$ 上连续,即$\int (\psi(x - t))^2 \mathrm{d}F(x) - (\lambda(t))^2$ 在 $\mathscr{U}$ 上连续且取正值,记 $\lambda'(a) = \left.\dfrac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\right|_{t=a}$,则

$$\sqrt{n}(T_n - T(F)) \xrightarrow{\mathrm{d.}} N(0, V(T, F)),$$

其中 $V(T, F)$ 为渐近方差,

$$V(T, F) = \int \left(\frac{\psi(x - T(F))}{\lambda'(T(F))} \right)^2 \mathrm{d}F(x).$$

2° 稳健性

定理 4 (定性稳健性)　设 ψ 有界非降,$\lambda(t, F) = 0$ 的根 $T(F)$ 存在且唯一,则 T 在 F 处弱连续,从而(依第 1 章定理 1)$\{T_n\}$ 在 F 处定性稳健.

由 ψ 定义的位置 M 估计的影响函数为

$$\mathrm{IF}(x, \psi, F) = -\frac{\psi(x - T(F))}{\lambda'(T(F))}. \tag{2-5}$$

因此,当 ψ 有界时,相应 M 估计的过失敏感度 $\gamma^*(\psi, F) < \infty$,是 B 稳健的.

定理 5 (崩溃点)　设 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} F$, $T_n = T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 是由 ψ 定义的位置 M 估计.

(i) 若 ψ 非降,$\psi(-\infty) < 0 < \psi(\infty)$,则 ψ 有界时 T_n 的渐近崩溃点和三种样本的崩溃点相等,它们是

$$\varepsilon^*(\psi) = \hat{\varepsilon}_{\mathrm{A}} = \hat{\varepsilon}_{\mathrm{R}} = \hat{\varepsilon}_{\mathrm{SR}} = \frac{\min\{\psi(\infty) - \psi(-\infty)\}}{\psi(\infty) - \psi(-\infty)} \leqslant \frac{1}{2},$$

且达到最大值 1/2 的充分必要条件是 $\psi(\infty) = -\psi(-\infty)$. ψ 无界时,

$$\varepsilon^*(\psi) = 0, \quad \hat{\varepsilon}_{\mathrm{A}} = \frac{1}{n+1}, \quad \hat{\varepsilon}_{\mathrm{R}} = \hat{\varepsilon}_{\mathrm{SR}} = 1/n.$$

(ii) 若 $\psi = \rho'$, $\min\limits_t \rho(t) = \rho(0) = 0$,且 $t < 0$ 时,ρ 非增,$t > 0$ 时,ρ 非降,$0 < \lim\limits_{|t| \to \infty} \rho(t) = M < \infty$,记 $a = a(F) = \inf\limits_t \int \rho(x - t) \mathrm{d}F(x)$,则 $\{T_n\}$ 的渐近崩溃点为

$$\varepsilon^*(\psi, F) = \frac{M - a}{2M - a}.$$

这种情况下的样本崩溃点比较复杂(见文献[6]).

注意:定理 5 中(i) 对应的 ρ 是凸函数,这时的渐近崩溃点只与 ψ 有关,与总体分布 F 无关,样本崩溃点也与样本无关;在(ii) 的情况下渐近崩溃点 ε^* 与 ψ 和 F 都有关,而且总有 $\varepsilon^* < 1/2$.

例 1　样本均值的不稳健性.

本篇 1.2.2 小节已指出样本均值不是定性稳健的. 由式(2-5)和定理 5 可知,样本均值的影响函数无界,即 $\gamma^* = \infty$,也不是 B 稳健的;渐近崩溃点 $\varepsilon^* = 0$,样本崩溃点分别为 $\widehat{\varepsilon}_A = 1/(n+1)$, $\widehat{\varepsilon}_R = \widehat{\varepsilon}_{SR} = 1/n$,因此,样本均值不具有稳健性.

例 2　样本中位数的稳健性.

在 1.2.2 小节讲过样本中位数的定性稳健性. 若分布 F 有密度 f, 且 $f(F^{-1}(\frac{1}{2})) > 0$. 则由式(2-5)知,样本中位数 m_X 的影响函数为

$$\mathrm{IF}(x, m_X, F) = \frac{\mathrm{sgn}(x - F^{-1}(\frac{1}{2}))}{f(F^{-1}(\frac{1}{2}))},$$

显然 $\gamma^*(m_X) < \infty$, 即样本中位数是 B 稳健的, 而且由定理 5 知, $\varepsilon^*(m_X) = \widehat{\varepsilon}_A(m_X) = \widehat{\varepsilon}_R(m_X) = \widehat{\varepsilon}_{SR}(m_X) = \frac{1}{2}$,都达到了最大值,因此,样本中位数具有稳健性.

由定理 4、定理 5 和式(2-5)可知, ψ 有界时相应的 M 估计具有多方面的稳健性. 由例 2 知,样本中位数有很好的稳健性,因此它们是比较常用的位置估计,尤其是在探索性数据分析中经常用它们.

2.1.3　尤伯 M 估计和中位数的优良性

1. 尤伯 M 估计的优良性

表 2-1 给出了尤伯 M 估计的 ψ 函数,记作 ψ_H,即

$$\psi_H(t) = \begin{cases} t & (|t| \leqslant K), \\ K\mathrm{sgn}t & (|t| > K). \end{cases} \tag{2-6}$$

它是连续、非降、有界的奇函数. 由 2.1.2 小节可知,只需对分布 F 稍加条件,相应的 M 泛函就有弱连续性,从而尤伯 M 估计是定性稳健的;显然它还是 B 稳健的,它的渐近崩溃点和三种样本崩溃点与 F 和样本无关,并达到了最大值的 1/2. 尤伯还证明了尤伯 M 估计在极小化极大准则下的最优性.

记标准正态分布 Φ 的 ε(对称)污染邻域为

$$\mathscr{G}_\varepsilon^*(\Phi) = \{(1-\varepsilon)\Phi + \varepsilon H: H \text{ 为关于原点对称的分布}\}. \tag{2-7}$$

假定 ψ 函数集合为

$$\Psi = \{\psi: \psi \text{ 是有界连续且非降的奇函数}, \psi' \text{ 几乎处处存在,且有界}\}.$$

记总体分布为 F 时,由 ψ 定义的 M 估计的渐近方差为 $V(\psi, F)$,则有如下定理.

定理 6　在上述记号下,对于给定的 $\varepsilon \in (0,1/2)$,当式(2-5)中的 K 满足 $\frac{2\phi(K)}{K} - 2\Phi(-K) = \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}$ 时,

$$\sup_{F \in \mathscr{G}_\varepsilon^*} V(\psi_H, F) = \inf_{\psi \in \Psi} \sup_{F \in \mathscr{G}_\varepsilon^*} V(\psi, F).$$

其中 ϕ 是标准正态密度函数.

尤伯M估计在汉甫准则下也是最优的，即在满足 $\gamma^* \leqslant c$ 的 $\phi \in \Psi$ 时，尤伯M估计在正态分布下的渐近方差达到最小(见文献[2]).

在 ψ_H 中常用的 K 值在1与2之间，对应于污染比例 ε 在1% ~ 10% 的情况；ε 大时，K 应该取小些的值.

注意：当 $\mathscr{G}_\varepsilon^*(\Phi)$ 中的 Φ 换成满足一定条件的分布 G 时，也有类似的结论(见文献[2]).

2.样本中位数的优良性

除了上述例2中所述的稳健性外，尤伯还证明了样本中位数是按极小化极大准则的一种最优估计.

设密度函数 g 关于原点对称，单峰，$g(0) > 0$，其分布函数为 G，G 的 ε 污染邻域

$$\mathscr{G}_\varepsilon = \{(1-\varepsilon)G + \varepsilon H : H \text{ 为分布函数}\},$$

则有如下定理.

定理7 记 $\mathscr{T}$ 为一维位置泛函的全体，med(·)表示与中位数对应的统计泛函，则对于任意 $\varepsilon \in (0, \frac{1}{2})$,

$$\sup_{F \in \mathscr{G}_\varepsilon} |\operatorname{med}(F) - \operatorname{med}(G)| = \inf_{T \in \mathscr{T}} \sup_{F \in \mathscr{G}_\varepsilon} |T(F) - T(G)|.$$

由于当 $0 < \varepsilon < \frac{1}{2}$ 时，任何 $F \in \mathscr{G}_\varepsilon$ 的中位数都唯一确定，从而med(·)在 F 处弱连续，样本中位数在 F 处相合.可见 $|\operatorname{med}(F) - \operatorname{med}(G)|$ 就是在用样本中位数估计 $\operatorname{med}(G)$ 时，由数据中的过失值(从而实际分布为 F)所产生的渐近偏差.

定理7表明，在一切位置估计中，样本中位数使在 G 的 ε 污染邻域 $\mathscr{G}_\varepsilon$ 中的最大渐近偏差达到最小.

注意到，在 $\mathscr{G}_\varepsilon^*$ 中要求 H 是对称分布的，Ψ 中的 ϕ 是奇函数，从而相应的M估计在 $\mathscr{G}_\varepsilon^*$ 上都是渐近无偏的，因此由定理6和定理7可知，若假定模型 G 对称，当过失值也对称时，应选用类似于尤伯M估计的方法，以减小估计方差.但当过失值不对称，而可能产生较大系统偏差时，则应该使用样本中位数，以避免造成大的偏差.

2.1.4 其他常用的估计

1.W估计

W估计实际是M估计的另一种形式.记 $W(t) = \phi(t)/t$，则定义M估计的式(2-2)可以改写为

$$T_n = \sum_{i=1}^{n} W(X_i - T_n)X_i, \tag{2-8}$$

满足式(2-8)的 $T_n = T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 称为**W估计**.它在形式上是 $\{X_i\}$ 的加权和.式(2-8)也提供了一种迭代计算 T_n 的方法：给一个初值 $T_n^{(0)}$，代入式(2-8)右边，即可得到左边的 $T_n^{(1)}$.

2. L估计

L估计是次序统计量线性组合(linear combination of order statistics)的简称.次序统计量是将样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 按从小到大的次序排列得到的统计量($X_{(1)}, X_{(2)}, \cdots, X_{(n)}$),其中 $X_{(1)} \leqslant X_{(2)} \leqslant \cdots \leqslant X_{(n)}$.显然样本中位数

$$\operatorname{med}(\{X_i\}) = \operatorname{med}(X_1, X_2, \cdots, X_n) = \begin{cases} X_{(K)} & (n = 2K-1), \\ \frac{1}{2}(X_{(K)} + X_{(k+1)}) & (n = 2K), \end{cases}$$

是L统计量.

除 $\operatorname{med}(\{X_i\})$ 之外,切尾均值是L统计量中另一个最常用的位置估计.记 $\{x\}^*$ 为 x 的小数部分,$[x]^*$ 为 x 的整数部分,对于 $0 < \alpha < \frac{1}{2}$,α **切尾均值**定义为

$$\bar{X}_\alpha^* = \frac{1}{n(1-2\alpha)}\left[(1 - \{\alpha n\}^*)(X_{([\alpha n]^*+1)} + X_{(n-[\alpha n]^*)}) + \sum_{[\alpha n]^*+2}^{n-[\alpha n]^*-1} X_{(i)}\right].$$

记 $F^{-1}(t) = \inf\{x : F(x) > t\}$,则与 $\bar{X}_\alpha^*$ 相应的统计泛函是

$$T_\alpha(F) = \frac{1}{1-2\alpha}\int_\alpha^{1-\alpha} F^{-1}(t)\mathrm{d}t.$$

它是中心位置泛函,而且 $T_\alpha(F_n) = \bar{X}_\alpha^*$($F_n$ 是相应于样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的经验分布).通常将 $\bar{X}_\alpha^*$ 简化为

$$\bar{X}_\alpha = \frac{1}{n - 2[\alpha n]^*}\sum_{[\alpha n]^*+1}^{n-[\alpha n]^*} X_{(i)}.$$

二者在大样本意义下是等价的.

α 切尾均值有以下性质:

1° 对于任意 $0 < \alpha < 1/2$,T_α 在整个一维分布函数空间 $\mathscr{M}_1$ 上弱连续,从而 α 切尾均值在任一 $F \in \mathscr{M}_1$ 处定性稳健.

2° 记 $W_\alpha(F) = \alpha(F^{-1}(\alpha) + F^{-1}(1-\alpha)) + \int_\alpha^{1-\alpha} F^{-1}(t)\mathrm{d}t$,则 α 切尾均值在 F 处的影响函数有界,因此是B稳健的.影响函数的表达式为

$$\operatorname{IF}(x, T_\alpha, F) = \begin{cases} \dfrac{(F^{-1}(\alpha) - W_\alpha(F))}{(1-2\alpha)} & (x < F^{-1}(\alpha)), \\ \dfrac{(x - W_\alpha(F))}{(1-2\alpha)} & (F^{-1}(\alpha) \leqslant x \leqslant F^{-1}(1-\alpha)), \\ \dfrac{(F^{-1}(1-\alpha) - W_\alpha(F))}{(1-2\alpha)} & (x > F^{-1}(1-\alpha)). \end{cases}$$

3° α 切尾均值 $\bar{X}_\alpha$ 的渐近崩溃点 $\varepsilon^*(T_\alpha) = \alpha$ 与总体分布无关;样本崩溃点只与样本大小有关,与样本中的观测值无关,分别为

$$\hat{\epsilon}_A = \frac{K}{(n+k)}, \quad \hat{\epsilon}_R = \hat{\epsilon}_{SR} = \frac{[\alpha n]^* + 1}{n},$$

其中 $K = \min\{m : m > [\alpha(n+m)]^*, m \text{ 为自然数}\}$.

4° 考虑由式(2-7)定义的正态分布的污染邻域$\mathscr{F}_\varepsilon^*$，对于任给$\varepsilon\in(0,1/2)$，当$K$满足定理6中的条件时，取$\alpha=(1-\varepsilon)\Phi(-K)+\varepsilon/2$，则$\alpha$切尾均值在$\mathscr{F}_\varepsilon^*$上的最大渐近方差在位置L估计类中达到极小.

3. R估计

R估计是指由秩(rank)检验导出的估计. R估计和R检验是非参数统计研究的内容之一. 作为稳健位置估计，用得比较多的是由维尔柯克逊(F. Wilcoxon)检验导出的霍奇斯-莱曼(Hodges-Lehmann)估计，简称**H-L估计**. 设$X_1,X_2,\cdots,X_n\overset{\text{i.i.d.}}{\sim}F$，$F$是对称分布，则对称中心的H-L估计为

$$T_n=\operatorname{med}\left\{\frac{1}{2}(X_i+X_j):1\leqslant i,j\leqslant n\right\}.$$

它相应的统计泛函$T(F)$由如下的等式定义：

$$\int_0^1 F(2T(F)-F^{-1}(s))\mathrm{d}s=\frac{1}{2}.$$

它是中心位置泛函. 习惯上将H-L估计表示为

$$T_n^*=\operatorname{med}\left\{\frac{1}{2}(X_i+X_j):1\leqslant i\leqslant j\leqslant n\right\},$$

它和上面的T_n是渐近等价的.

H-L估计$\{T_n\}$具有以下稳健性：

1° 当$T(F)$唯一确定时，函数$T(\cdot)$在F处弱连续，从而$\{T_n\}$在F处定性稳健；

2° 当对称分布F有密度f时，H-L估计的影响函数

$$\mathrm{IF}(x,T,F)=\frac{F(x)-\dfrac{1}{2}}{\int(f(y))^2\mathrm{d}y}$$

有界，故H-L估计是B稳健的.

3° H-L估计的渐近崩溃点是

$$\varepsilon^*=1-\frac{1}{\sqrt{2}}=0.293,$$

与总体分布无关；样本崩溃点

$$\hat{\varepsilon}_A(T_n)=\frac{K}{(n+K)},$$

其中

$$K=\min\left\{m:2nm+m^2\geqslant\frac{(m+n)^2}{2},m\text{ 为自然数}\right\};$$

$$\hat{\varepsilon}_R(T_n)=\hat{\varepsilon}_{SR}(T_n)=\frac{L}{(n+L)},$$

$$L=\min\{m:2(n-m)m+m^2\geqslant n^2/2,m\text{ 为自然数}\}.$$

它们都只与样本量n有关，与样本观测值无关.

在三类稳健位置估计中(W估计和M估计本质上是一样的)，M估计最常用，因为它有多方面的稳健性，而且有较高的效率；主要缺点是没有显式表达，需要迭代

计算. α 切尾均值的最大优点是计算简单便于应用,也很直观,但它不能兼顾高崩溃点和估计的高效率:切尾比例 α 小时,崩溃点低,α 大时估计效率低. H-L 估计的计算比较简单,崩溃点也较高,但它不是极小化极大准则下的最优估计.

M 估计的另一个优点是容易推广到多维情况. 由于多维向量不是全序的,不能像一维情况那样对样本中的观测值排序而得到次序统计量和秩统计量,因此给 L 估计和 R 估计向多维推广带来了困难.

作为一维位置估计,α 切尾均值和 H-L 估计还有一个优于 M 估计的地方,即它们都是刻度同变的. 如果对于任何 $a > 0$, $T_n(aX_1, aX_2, \cdots, aX_n) = aT_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$,则 $T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 叫做刻度同变的),而 M 估计(中位数和样本均值除外)没有刻度同变性. 因此,当刻度未知时,需预先或同时估计刻度参数(参见 2.2、2.3 节).

除这三类估计外,还有一些其他类型的稳健位置估计. 读者可以参阅文献[1].

2.2 刻度估计

2.2.1 刻度泛函和刻度参数

刻度参数是用来衡量随机变量分布分散(集中)程度的量,在实际中表现为数据的分散(集中)程度. 显然,它与随机变量和数据的单位(坐标轴上的刻度)有关. 例如,某班级学生的身高,如用米为单位,身高数据就比较集中,如用厘米为单位,数据就显得分散.

通常称 $\{F(x,\sigma): F(x,\sigma) = G(\frac{x}{\sigma}): \sigma > 0\}$ 为(由分布 G 生成的)刻度分布族,σ 叫做刻度参数. 与"位置"类似,"刻度"也可以用不同的量表示.

设 $S(\cdot)$ 是定义在 $\mathscr{F} \subset \mathscr{M}_1$ 上的非负泛函,如果 $S(\cdot)$ 有刻度同变性,即对于任何 $F \in \mathscr{F}$ 和 $a > 0$,有

$$S(F(\frac{x}{a})) = aS(F) \qquad (X \sim F(x) \text{时}, aX \sim F(\frac{x}{a})),$$

且对于标准正态分布 Φ,有 $S(\Phi) = 1$,则称 $S(\cdot)$ 为 $\mathscr{F}$ 上的刻度泛函,称 $S(F)$ 为 F 的刻度参数.

有些学者在定义刻度泛函时不要求 $S(\Phi) = 1$. 这里要求这一条件是考虑到两个因素:一是因为刻度同变泛函 $\tilde{S}(\cdot)$ 乘以一个正数仍是刻度同变的,有很大的任意性;二是考虑到"标准差"是最常用的刻度参数,正态分布是最常用的分布,因此希望任一刻度泛函在正态分布处的值与标准差一致.

由刻度泛函即可得到相应刻度参数的估计量. 若 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} F \in \mathscr{F}$, F_n 是其经验分布, S 是 $\mathscr{F}$ 上刻度泛函,则 $S_n = S(F_n)$ 是刻度参数 $S(F)$ 的估计. 易知,以上定义的 $S_n = S_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 有刻度同变性,即对于任何 $a > 0$,

$$S_n(aX_1, aX_2, \cdots, aX_n) = aS_n(X_1, X_2, \cdots, X_n).$$

除了刻度同变性外,许多刻度泛函(及相应的刻度估计)还有位移不变性和符

号不变性等性质. 这对"刻度"来说,也是比较重要的性质,这说明,随机变量和数据经过位移或变号后,其分散(集中)程度并没有改变.

如果对于任何 $a \in \mathbf{R}$, $S(F(\cdot - a)) = S(F(\cdot))$,则定义在 $\mathscr{F} \subset \mathscr{M}_1$ 上的泛函 S 叫做是位移不变的;如果 $S(F) = S(F^c)$,这里 $F^c(x) = 1 - F(x-0)$,($X \sim F(x)$,即 $F(x) = P(X \leqslant x)$ 时,$-X \sim F^c(x)$),则泛函 S 叫做是符号不变的. 如果对于任意 $a \in \mathbf{R}$, $S_n(X_1 + a, X_2 + a, \cdots, X_n + a) = S_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$,则统计量 $S_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 叫做是位移不变的;如果 $S_n((X_1, X_2, \cdots, X_n) = S_n(-X_1, -X_2, \cdots, -X_n)$,则统计量 $S_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 叫做是符号不变的. 类似地,可以定义刻度不变性,符号同变性等.

例3　标准差 $\sigma(F) = \left(\int x^2 \mathrm{d}F - (\int x \mathrm{d}F)^2\right)^{1/2}$ 是刻度泛函,它的定义域是

$$\mathscr{F} = \{F : F \in \mathscr{M}_1, \int x^2 \mathrm{d}F < \infty\}.$$

$\sigma(F)$ 还有位移不变性和符号不变性等性质.

例4　t 分位差($0 < t < 1/2$) $\tilde{Q}_t(F) = F^{-1}(1-t) - F^{-1}(t)$ 是刻度同变的,定义域是整个 $\mathscr{M}_1$,它也有位移不变性和符号不变性等性质,但当 $t \neq \Phi(-0.5)$ 时,$\tilde{Q}_t(\Phi) \neq 1$. 若定义 $Q_t(F) = (F^{-1}(1-t) - F^{-1}(t))/(\Phi^{-1}(1-t) - \Phi^{-1}(t))$,则 $Q_t(F)$ 不仅保持了 $\tilde{Q}_t(F)$ 的上述性质,而且 $Q_t(\Phi) = 1$,从而可知,Q_t 是刻度泛函. 常用的是 $t = 1/4$ 的情况.

由于刻度问题一般是伴随位置而产生的,故很少有单独的刻度问题. 这些将在2.3节讲述. 本节仅对若干较常用的刻度估计及其性质作了简要介绍,更详细的内容可参见文献[2].

2.2.2　M估计

1. 定义

定义2　设 $\xi(t)$ 是 $\mathbf{R}$ 上偶函数,$t > 0$ 时,ξ 非降,$\xi(0) < 0$, $\xi(\infty) > 0$,而且 $\int \xi(x) \mathrm{d}\Phi(x) = 0$. 记

$$\mathscr{F} = \left\{F \in \mathscr{M}_1 : \int \xi\left(\frac{x}{s}\right) \mathrm{d}F(x) = 0 \text{ 有解 } s = S(F) > 0\right\},$$

则称 S 为 $\mathscr{F}$ 上的刻度M泛函,称 $S(F)$ 为 F 的刻度参数.

易知方程 $\int \xi\left(\frac{x}{s}\right) \mathrm{d}F = 0$ 的解 $S(F)$ 具有刻度同变性. 又由 $\int \xi(x) \mathrm{d}\Phi(x) = 0$ 可知,$S(\Phi) = 1$,故 S 确是刻度泛函,而且 S 还是符号不变的. 但刻度M泛函一般没有位移不变性. 若 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} F$, F_n 是经验分布,则刻度参数 $S(F)$ 的M估计即是 $S_n = S(F_n)$,或等价地,是 $\sum_{i=1}^{n} \xi\left(\frac{x_i}{s}\right) = 0$ 的正值解 $S_n = S_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$. 易知统计量 S_n 有刻度同变性和符号不变性等性质,但一般不是位移不变的.

较常用的刻度M估计是尤伯M估计和中位"绝对差"、相应的 $\xi(t)$ 分别为

$$\xi_H(t) = \begin{cases} t^2 - \beta & (|t| \leqslant K), \\ K^2 - \beta & (|t| > K), \end{cases} \tag{2-9}$$

$$\xi_M(t) = \mathrm{sgn}(|t| - \Phi^{-1}(\frac{3}{4})), \tag{2-10}$$

其中 $\Phi^{-1}(3/4) \approx 0.6745$ 是标准正态的3/4分位数，

$$\beta = \int_{|x| \leqslant K} x^2 \mathrm{d}\Phi(x) + K^2(1 - \Phi(K) + \Phi(-K)). \tag{2-11}$$

以上 $\xi_H(t)$ 和 $\xi_M(t)$ 都满足 $\int \xi(x)\mathrm{d}\Phi(x) = 0$. 易验证由 $\int \xi_M(\frac{x}{s})\mathrm{d}F(x) = 0$ 定义的刻度泛函

$$S_M(F) = (\Phi^{-1}(3/4))^{-1}\mathrm{med}_F(|X|) \approx \mathrm{med}_F(|X|)/0.6745,$$

其中 $\mathrm{med}_F(|X|)$ 表示 $X \sim F$ 时 $|X|$ 的中位数. 这两个刻度M泛函都没有位移不变性，但有符号不变性.

2. 性质

设 $\xi(t)$ 满足定义2的条件，S 是由 ξ 定义的刻度M泛函，又 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} F$，$F_n$ 是经验分布，则 $S_n = S(F_n)$ 是刻度M估计. 令

$$\nu(s) = \int \xi(\frac{x}{s})\mathrm{d}F(x) \qquad (s > 0),$$

则有如下定理

定理 8（相合性与渐近正态性） 若 $S(F)$ 唯一确定，$\nu(s)$ 在 $S(F)$ 的一个邻域中连续，则 S_n 在 F 处弱、强相合. 若进一步假定 $\nu'(S(F)) < 0, 0 < \int (\xi(\frac{x}{S(F)}))^2 \mathrm{d}F(x) - (\nu(S(F)))^2 < \infty$ 且 $\sigma^2(s) \overset{\text{def}}{=} \int (\xi(x/s))^2 \mathrm{d}F(x) - (\nu(s))^2$ 在 $S(F)$ 的一个邻域中连续，则

$$\sqrt{n}(S_n - S(F)) \xrightarrow{\text{d.}} N(0, V(\xi, F)),$$

其中渐近方差

$$V(\xi, F) = \int \frac{\xi\left(\frac{x}{S(F)}\right)^2 \mathrm{d}F(x)}{\nu'(S(F))^2}.$$

定理 9（定性稳健性） 设 $\xi(t)$ 有界且在 $t = 0$ 处连续，又 $S(F)$ 唯一确定，则当 F 连续，或 ξ 连续时，S 在 F 处弱连续，从而 S_n 在 F 处定性稳健.

设刻度M泛函 S 在 F_0 处满足 $0 < S(F_0) < \infty$，F_0 的 ε 污染邻域为

$$\mathscr{F}_\varepsilon = \mathscr{F}_\varepsilon(F_0) = \{(1 - \varepsilon)F_0 + \varepsilon H : H \in \mathscr{M}_1\},$$

则对于刻度而言，除了希望过失值的出现不破坏 $S(F_0)$ 的有穷性外，还希望 $S(F_0) > 0$ 的性质也不被破坏. 由此可定义两种渐近崩溃点：

$$\varepsilon^* = \varepsilon^*(\xi, F_0) = \sup\{\varepsilon : \text{对于任意 } F \in \mathscr{F}_\varepsilon, S(F) < \infty\},$$

$$\varepsilon^{**} = \varepsilon^{**}(\xi, F_0) = \sup\{\varepsilon : \text{对于任意 } F \in \mathscr{F}_\varepsilon, 0 < S(F) < \infty\}.$$

定理 10（渐近崩溃点） 设 $F_0(x)$ 在 $x = 0$ 处连续，$0 < S(F_0) < \infty$，则当 ξ 有界时，

$$\varepsilon^{*} = \varepsilon^{*}(\xi, F_0) = -\frac{\xi(0)}{\xi(\infty) - \xi(0)},$$

$$\varepsilon^{**} = \varepsilon^{**}(\xi, F_0) = \frac{\min\{-\xi(0), \xi(\infty)\}}{\xi(\infty) - \xi(0)}.$$

当 ξ 无界时，$\varepsilon^{*}(\xi, F_0) = \varepsilon^{**}(\xi, F_0) = 0$.

显然，当 ξ 有界时，$\varepsilon^{*} > 0, 0 < \varepsilon^{**} \leqslant 1/2$. 当且仅当 $-\xi(0) = \xi(\infty)$ 时，

$$\varepsilon^{*} = \varepsilon^{**} = 1/2.$$

S_n 在 F 处的影响函数为

$$\mathrm{IF}(x;\xi, F) = \frac{\xi(x/S(F))}{-\nu'(S(F))}. \tag{2-12}$$

3. 尤伯 M 估计

由于尤伯 M 估计对应的 ξ_{H}(见式(2-9))是有界连续的，根据定理 8 和定理 9 可得到如下结论.

定理 11 如分布函数 F 满足 $F(0) - F(0-) < 1 - \beta/K^2$，则尤伯的刻度 M 泛函 S_{H} 在 F 处的值 $S_{\mathrm{H}}(F)$ 唯一确定，S_{H} 在 F 处弱连续，相应的 M 估计 $S_{\mathrm{H}n}$ 在 F 处定性稳健，且弱、强相合. 若进一步假定 $F(k) - F(-k) > 0$. 则

$$\sqrt{n}(S_{\mathrm{H}n} - S_{\mathrm{H}}(F)) \xrightarrow{\mathrm{d.}} N(0, V(\xi_{\mathrm{H}}, F)),$$

其中 $V(\xi_{\mathrm{H}}, F)$ 可由定理 8 得到.

尤伯刻度 M 估计的影响函数可由式(2-12) 得到，它是有界函数，故 $\{S_{\mathrm{H}n}\}$ B 稳健. 特别地，如果 F 关于原点对称，且有密度 f，记 $K_F = KS_{\mathrm{H}}(F)$，则

$$\mathrm{IF}(x, \xi_{\mathrm{H}}, F) = \frac{\xi_{\mathrm{H}}(x/S_{\mathrm{H}}(F))S_{\mathrm{H}}(F)}{2\int_{-K_F}^{K_F}(x/S_{\mathrm{H}}(F))^2\mathrm{d}F(x) + 2K^3 f(K_F)}.$$

尤伯刻度 M 估计的渐近崩溃点为

$$\varepsilon_{\mathrm{H}}^{*} = \frac{\beta}{K^2}, \quad \varepsilon_{\mathrm{H}}^{**} = \frac{\min\{\beta, K^2 - \beta\}}{K^2}.$$

4. 中位绝对差

中位绝对差是由 $\xi_{\mathrm{M}}(t)$(见式(2-10)) 定义的刻度 M 估计. 其泛函形式为

$$S_{\mathrm{M}}(F) = \mathrm{med}_F(|X|)/0.6745.$$

设 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\mathrm{i.i.d.}}{\sim} F$，$F_n$ 是经验分布，则样本中位绝对差为

$$S_{\mathrm{M}n} = S_{\mathrm{M}}(F_n) = \frac{\mathrm{med}\{|X_1|, |X_2|, \cdots, |X_n|\}}{0.6745}.$$

S_{M} 和 $S_{\mathrm{M}n}$ 有以下性质：

1° S_{M} 和 $S_{\mathrm{M}n}$ 具有符号不变性；

2° 若 $X \sim F$，$|X|$ 的中位数唯一确定，则 S_{M} 在 F 处弱连续，从而 $\{S_{\mathrm{M}n}\}$ 在 F 处定性稳健；

3° 对于给定的 F，记 $\mu_F = \Phi^{-1}(3/4)S_{\mathrm{M}}(F)$，若 F 有密度 f，且 $f(\pm\mu_F) > 0$，则 $S_{\mathrm{M}n}$ 的影响函数为

$$\mathrm{IF}(x,S_M,F)=\frac{\mathrm{sgn}(|x|-\mu_F)}{2\mu_F[f(\mu_F)+f(-\mu_F)]};$$

4° S_{Mn} 的渐近崩溃点 $\varepsilon^*=\varepsilon^{**}=1/2$,达到了最大值.

2.2.3 L 估计

较常用的刻度 L 估计是四分位差和切尾"标准差".

1. 四分位差

四分位差是 2.2.1 小节例 4 中 $t=1/4$ 的情况. 省去下标 1/4,定义

$$Q(F)=\frac{(F^{-1}(3/4)-F^{-1}(1/4))}{(\Phi^{-1}(3/4)-\Phi^{-1}(1/4))}\approx 0.74(F^{-1}(3/4)-F^{-1}(1/4)),\quad (2\text{-}13)$$

其中标准正态四分位差 $(\Phi^{-1}(3/4)-\Phi^{-1}(1/4))\approx(0.74)^{-1}$. 对于 $X_1,X_2,\cdots,X_n\overset{\text{i.i.d.}}{\sim}F$,记 $X_{(1)},X_{(2)},\cdots,X_{(n)}$ 为次序统计量,F_n 为经验分布,则可以取

$$F_n^{-1}(1/4)=\begin{cases}(X_{(n/4)}+X_{(n/4+1)})/2 & (n=4K),\\ X_{([n/4]^*+1)} & (n\neq 4K);\end{cases}$$

$$F_n^{-1}(3/4)=\begin{cases}(X_{(3n/4)}+X_{(3n/4+1)})/2 & (n=4K),\\ X_{([3n/4]^*+1)} & (n\neq 4K).\end{cases}$$

于是样本四分位差为

$$Q_n=Q(F_n)=0.74(F_n^{-1}(3/4)-F_n^{-1}(1/4)).\quad (2\text{-}14)$$

四分位差 Q 和 Q_n 具有位移不变性和符号不变性,其稳健性如下:

1° 若 F 的 1/4 和 3/4 分位数均唯一确定,则 Q 在 F 处弱连续,从而 $\{Q_n\}$ 定性稳健;

2° Q_n 的渐近崩溃点 $\varepsilon^*=\varepsilon^{**}=1/4$;

3° 若 F 有密度 f,且 $f(F^{-1}(1/4))>0$, $f(F^{-1}(3/4))>0$,则

$$\mathrm{IF}(x,Q,F)=0.74\left(\frac{1-t-\delta_x(F^{-1}(3/4))}{f(F^{-1}(3/4))}-\frac{t-\delta_x(F^{-1}(1/4))}{f(F^{-1}(1/4))}\right),$$

其中 $\delta_x(a)$ 是以概率 1 取值为 a 的分布函数,即

$$\delta_x(a)=\begin{cases}0 & (x<a),\\ 1 & (x\geq a).\end{cases}$$

显然 Q_n 的影响函数有界,即 Q_n 是 B 稳健的.

2. 切尾"标准差"

切尾比例为 $\alpha(0<\alpha<1/2)$ 的切尾"标准差"泛函定义为

$$S_\alpha(F)=\left(b(\alpha)\int_\alpha^{1-\alpha}(F^{-1}(t))^2\mathrm{d}t\right)^{1/2},$$

其中 $b(\alpha)=(1-2\alpha+2\Phi^{-1}(\alpha)\phi(\Phi^{-1}(\alpha))^{-1}$. 易验证 $S_\alpha(\Phi)=1$, S_α 刻度同变,故 S_α 是刻度泛函. 此外,当 F 在 $F^{-1}(\alpha)$ 和 $F^{-1}(1-\alpha)$ 处连续时, $S_\alpha(F)$ 具有符号不变性,但 $S_\alpha(F)$ 没有位移同变性. 与切尾均值类似,若 $X_1,X_2,\cdots,X_n\overset{\text{i.i.d.}}{\sim}F$, F_n 是经验分布,则 $S_\alpha(F)$ 的估计 $S_\alpha(F_n)$ 就是样本切尾"标准差"

$$S_{\alpha n}^{*}=\frac{b(\alpha)}{n}\Big((1-\{\alpha n\}^{*})(X_{([\alpha n]^{*}+1)}^{2}+X_{(n-[\alpha n]^{*})}^{2})+\sum_{[\alpha n]^{*}+2}^{n-[\alpha n]^{*}-1}X_{(i)}^{2}\Big).$$

实际应用时将其简化为

$$S_{\alpha n}=\frac{b(\alpha)}{n}\sum_{[\alpha n]^{*}+1}^{n-[\alpha n]^{*}}X_{(i)}^{2}.$$

切尾"标准差"有以下稳健性：

1° S_α 在整个分布函数空间 $\mathscr{M}_1$ 上弱连续，从而 $\{S_{\alpha n}\}$ 在任一分布 F 处定性稳健；

2° $S_{\alpha n}$ 的渐近崩溃点 $\varepsilon^{*}=\varepsilon^{**}=\alpha$；

3° 记 $d(F)=\int_{F^{-1}(\alpha)}^{F^{-1}(1-\alpha)}x^2\mathrm{d}F(x)+\alpha((F^{-1}(\alpha))^2+(F^{-1}(1-\alpha))^2)$，又设 F 有密度 f，且在 $(F^{-1}(\alpha),F^{-1}(-\alpha))$ 上 $f>0$，则 $S_\alpha(S_{\alpha n})$ 的影响函数为

$$\mathrm{IF}(x,S_\alpha,F)=\begin{cases}b(\alpha)\dfrac{(F^{-1}(\alpha))^2-d(F)}{2S_\alpha(F)} & (x<F^{-1}(\alpha)),\\ b(\alpha)\dfrac{x^2-d(F)}{2S_\alpha(F)} & (F^{-1}(\alpha)\leqslant x\leqslant F^{-1}(1-\alpha)),\\ b(\alpha)\dfrac{(F^{-1}(1-\alpha))^2-d(F)}{2S_\alpha(F)} & (x>F^{-1}(1-\alpha)).\end{cases}$$

显然 $\mathrm{IF}(x,S_\alpha,F)$ 有界，即 S_α 是 B 稳健的.

上述的尤伯 M 估计和中位绝对差，以及这里的切尾"标准差"均不具有位移不变性. 实际上它们只能用于"位置"已知（不妨设之为原点，否则将之平移到原点，即位置为 0）的情形. 当位置也未知时，则需要估计位置，并将之改变为位移不变的刻度估计. 详见下一小节和 2.3 节.

2.2.4 位移不变的刻度估计

若 S 是一个刻度泛函，S_n 是相应的刻度估计. 不难验证，对于任一位置泛函 T 和任一位置估计 T_n，记

$$F_T(x)=F(x-T(F)),\quad \mathfrak{S}(F)\xlongequal{\text{def}}S(F_T),$$

$$\mathfrak{S}_n(X_1,X_2,\cdots,X_n)\xlongequal{\text{def}}S_n(X_1-T_n,X_2-T_n,\cdots,X_n-T_n),$$

则 $\mathfrak{S}$ 和 $\mathfrak{S}_n$ 具有位移不变性；而且当 T 是中心位置泛函，T_n 具有符号同变性（即 $T_n(-X_1,-X_2,\cdots,-X_n)=-T_n(X_1,X_2,\cdots,X_n)$）时，若 S 和 S_n 具有符号不变性，则 $\mathfrak{S}$ 和 $\mathfrak{S}_n$ 仍保留符号不变性.

$\mathfrak{S}$ 和 $\mathfrak{S}_n$ 实质上是先将随机变量和数据"中心化"，再对中心化后的随机变量和数据求刻度. 问题在于不要因为"位置"的加入而改变原来刻度的好性质. 因此，要求位置 T 和 T_n 的性质，特别是稳健性至少不能比原来的刻度 $S(\cdot)$ 和 S_n 的性质差.

1. 中位绝对差

中位绝对差 $\text{med}_F(|X|)/0.6745$ 的最大特点是崩溃点达到了最大值(1/2). 因此用来使之位移不变的位置是中位数. 定义新的中位绝对差,记作 MAD(median absolute deviation),

$$M_a = \text{MAD}(F) = \frac{\text{med}_F(|X - \text{med}_F(X)|)}{0.6745}, \tag{2-15}$$

相应的估计量为

$$M_{an} = \text{MAD}(F_n) = \frac{\text{med}(|X_j - \text{med}(X_i)|, 1 \leqslant j \leqslant n)}{0.6745}. \tag{2-16}$$

下面凡讲到中位绝对差均指 M_a 和 M_{an}. 中位数 med 和中位绝对差 MAD 都具有高崩溃点 1/2,常用于探索性数据分析,或作为迭代计算时的初值.

2. 切尾标准差

真正的切尾标准差应该先用切尾均值将总体和样本中心化. 沿用前面 2.1.4 小节和本节的记号,T_α 表示 α 切尾均值泛函,$\bar{X}_\alpha$ 表示样本的 α 切尾均值,则 α 切尾标准差泛函为

$$\sigma_\alpha(F) = \left(b(\alpha)\int_\alpha^{1-\alpha}(F^{-1}(t) - T_\alpha(F))^2\mathrm{d}t\right)^{1/2}, \tag{2-17}$$

相应的样本 α 切尾标准差为

$$\sigma_{\alpha n} = \sigma_\alpha(F_n) = \left(\frac{b(\alpha)}{n}\sum_{[\alpha n]^*+1}^{n-[\alpha n]^*}(X_{(i)} - \bar{X}_\alpha)^2\right)^{1/2}. \tag{2-18}$$

由诸位置估计的性质和诸刻度估计的性质,容易得到中心化后诸刻度估计的性质. 简单地讲,中心化后刻度估计的性质有:

1° 中位绝对差 M_a、M_{an} 以及 α 切尾标准差 σ_α 和 $\sigma_{\alpha n}$ 均具有位移不变性和符号不变性;

2° 在适当的条件下,MAD 和 σ_α 都是弱连续的,因此相应的估计 $\{\text{MAD}_n\}$ 和 $\{\sigma_{\alpha n}\}$ 都有定性稳健性;

3° $\{\text{MAD}_n\}$ 和 $\{\sigma_{\alpha n}\}$ 的影响函数均有界,因此都是 B 稳健的;

4° 中位绝对差 M_{an} 的渐近崩溃点

$$\varepsilon^*(\text{MAD}) = \varepsilon^{**}(\text{MAD}) = 1/2,$$

α 切尾标准差 $\sigma_{\alpha n}$ 的渐近崩溃点 $\varepsilon^*(\sigma_\alpha) = \varepsilon^{**}(\sigma_\alpha) = \alpha$.

在刻度 M 估计中,除 MAD 外,很少单独用到中心化的刻度 M 估计. 在位置、刻度均未知的情况下,一般关心的是位置. 这时常将刻度估计作辅助估计,或者采用位置 - 刻度同时估计的 M 估计. 这些将在下节讨论.

2.3 位置 - 刻度估计

前面两节分别讨论了纯位置和纯刻度问题. 但实际中总体分布的位置和刻度往往都是未知的,需要根据实际问题适当处理.

2.3.1 刻度未知时的位置 M 估计

1. 一般方法

许多时候人们主要关心位置，这时未知的刻度就是多余参数（也称为讨厌参数）. 有些位置泛函和位置估计具有刻度同变性，例如样本均值、中位数和切尾均值等，刻度是否未知对它们没有影响. 但在稳健统计中，常用的位置 M 估计不具有刻度同变性，这就必须考虑刻度问题. 解决这个问题的较简单的办法是预先估计刻度参数，称之为辅助估计；然后将随机变量或数据改成以辅助刻度为单位进行位置估计，这样位置估计就具有刻度同变性了.

设 S 是一个刻度泛函，S_n 是刻度估计，定义位置 M 泛函 T 为方程

$$\int \psi\left(\frac{x-t}{S(F)}\right)\mathrm{d}F(x)=0 \tag{2-19}$$

的解 $T(F)$，相应的位置 M 估计 T_n 是方程

$$\sum_{i=1}^{n}\psi\left(\frac{X_i-t}{S_n}\right)=0 \tag{2-20}$$

的解 T_n，则由 $S(F)$ 和 S_n 的刻度同变性可知，$T(F)$ 和 T_n 是刻度同变的.

辅助刻度的选择应该尽量保持原位置 M 估计的好性质，特别是高崩溃点这一性质. 因此常用的辅助刻度是中位绝对差 MAD(MAD_n).

2. 尤伯位置 M 估计

设 S 是刻度泛函，S_n 是刻度估计. 以 S 为辅助刻度泛函的尤伯位置M泛函定义为方程

$$\int \psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{x-t}{S(F)}\right)\mathrm{d}F(x)=0 \tag{2-21}$$

的解 $T_{\mathrm{H}}(F)$，相应的 M 估计定义为方程

$$\sum_{i=1}^{n}\psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{X_i-t}{S_n}\right)=0 \tag{2-22}$$

的解 $T_{\mathrm{H}n}$，其中 ψ_{H} 如式(2-6) 所示.

最常用的辅助刻度是 M_a 和 M_{an}，其次是四分位差 Q 和 Q_n. 这时尤伯位置 M 估计有如下的同变性和稳健性：

1° 当 $S=M_a$ 或 $S=Q(\cdot)$，S_n 为相应的刻度估计时，T_{H} 和 T_n 具有刻度同变性和符号同变性.

2° 在较弱的条件下，T_{H} 弱连续，从而 $T_{\mathrm{H}n}$ 定性稳健.

3° 当分布 F 连续时，$T_{\mathrm{H}n}$ 的影响函数为

$$\mathrm{IF}(x,T_{\mathrm{H}},F)=\frac{S(F)\psi_{\mathrm{H}}\left(\dfrac{x-T_{\mathrm{H}}(F)}{S(F)}\right)-\mathrm{IF}(x,S,F)\displaystyle\int_{T_{\mathrm{H}}(F)-KS(F)}^{T_{\mathrm{H}}(F)+KS(F)}\frac{x-T_{\mathrm{H}}(F)}{S(F)}\mathrm{d}F(x)}{F(T(F)+KS(F))-F(T(F)-KS(F))}.$$

当辅助刻度 S 是 M_a 或 Q 时，其影响函数 $\mathrm{IF}(x,S,F)$ 都有界，从而 $\mathrm{IF}(x,T_{\mathrm{H}},F)$ 也有界. 因此 $T_{\mathrm{H}n}$ 仍是 B 稳健的.

4° $T_{\mathrm{H}n}$ 的渐近崩溃点取决于其辅助刻度的渐近崩溃点. 故当 $S=M_a$ 时，

$\varepsilon^*(T_H) = 1/2$；而当 $S = Q$ 时，$\varepsilon^*(T_H) = 1/4$.

2.3.2 位置 - 刻度同时估计

1. 位置 - 刻度 M 估计的定义

定义 3 当用 M 估计方法对位置 - 刻度同时进行估计时，称之为**位置 - 刻度 M 估计**.

设 ψ 是非降奇函数，$\psi(\infty) > 0$；ξ 是偶函数，$\xi(0) < 0$，$\xi(\infty) > 0$，在正半轴上 ξ 非降，则位置 - 刻度 M 泛函定义为方程组

$$\begin{cases} \int \psi\left(\frac{x-t}{s}\right) \mathrm{d}F(x) = 0, \\ \int \xi\left(\frac{x-t}{s}\right) \mathrm{d}F(x) = 0 \end{cases} \tag{2-23}$$

的解 $T(F)$ 和 $S(F) > 0$. 相应的 M 估计定义为方程组

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} \psi\left(\frac{X_i - t}{s}\right) = 0, \\ \sum_{i=1}^{n} \xi\left(\frac{X_i - t}{s}\right) = 0 \end{cases} \tag{2-24}$$

的解 $T_n = T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 和 $S_n = S_n(X_1, X_2, \cdots, X_n) > 0$.

文献[2]讨论了位置 - 刻度 M 估计的影响函数和渐近崩溃点，因表达式比较复杂，这里从略，但对某些具体估计有较简单的结果，这将在下面介绍. 需要指出的是，当如上的 ψ 和 ξ 都是有界函数时，(T_n, S_n) 的影响函数才有界.

例 5 样本均值和样本标准差

若取 $\psi(t) = t$，$\xi(t) = t^2 - 1$，则得到位置 - 刻度 M 泛函 $T(F) = \int x \mathrm{d}F(x)$，$S(F) = \left(\int (x - T(F))^2 \mathrm{d}F(x)\right)^{1/2}$. 这就是均值和标准差. 相应的 M 估计是样本均值和样本标准差.

2. 中位数和中位绝对差

取 $\psi(t) = \mathrm{sgn}(t)$，$\xi(t) = \mathrm{sgn}(|X| - \Phi^{-1}(3/4))$，则可得到位置 - 刻度 M 泛函

$$T(F) = \mathrm{med}(F),$$

$$S(F) = \frac{\mathrm{med}_F(|X - \mathrm{med}(F)|)}{0.6745} = \mathrm{MAD}(F).$$

相应的 M 估计为

$$T_n = \mathrm{med}\{X_1, X_2, \cdots, X_n\},$$

$$S_n = \frac{\mathrm{med}\{|X_1 - T_n|, |X_2 - T_n|, \cdots, |X_n - T_n|\}}{0.6745} = \mathrm{MAD}_n(X_1, X_2, \cdots, X_n).$$

它们的最大优点是崩溃点达到了最大值 1/2，它们的性质已分别在 2.1.2 小节和 2.1.3 小节以及 2.3.4 小节讨论了，这里不再重复.

3. 尤伯 M 估计

尤伯位置 - 刻度 M 估计对应的 ψ 和 ξ 函数分别为

$$\psi_{\mathrm{H}}(t)=\begin{cases}t & (|t|<K),\\ K\mathrm{sgn}(t) & (|t|>K),\end{cases}$$

$$\xi_{\mathrm{H}}(t)=\begin{cases}t^2-\beta & (|t|\leqslant K),\\ K^2-\beta & (|t|>K),\end{cases}$$

其中β为(2-11)式所示.相应的M泛函是方程组

$$\begin{cases}\int\psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{x-t}{s}\right)\mathrm{d}F(x)=0,\\ \int\xi_{\mathrm{H}}\left(\frac{x-t}{s}\right)\mathrm{d}F(x)=0\end{cases}$$

的解$(T_{\mathrm{H}}(F),S_{\mathrm{H}}(F))$,其中$S_{\mathrm{H}}(F)>0$.相应的M估计是方程组

$$\begin{cases}\sum_{i=1}^{n}\psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{X_i-t}{s}\right)=0,\\ \sum_{i=1}^{n}\xi_{\mathrm{H}}\left(\frac{X_i-t}{s}\right)=0\end{cases}$$

的解$(T_{\mathrm{H}n},S_{\mathrm{H}n})$,其中$S_{\mathrm{H}n}>0$.

尤伯位置-刻度M估计的主要性质有:

1° T_{H}和$T_{\mathrm{H}n}$具有刻度同变性和符号同变性,S_{H}和$S_{\mathrm{H}n}$有位移不变性和符号不变性.

2° $(T_{\mathrm{H}n},S_{\mathrm{H}n})$的影响函数有界,因此是B稳健的.

3° $(T_{\mathrm{H}n},S_{\mathrm{H}n})$的渐近崩溃点$\varepsilon^*=\beta/(\beta+K^2)$.

文献[2]对不同的K计算了ε^*的值($\beta=\beta(K)$由式(2-11)给出).例如$K=1.0$时,$\varepsilon^*=0.340$;$K=2.0$时,$\varepsilon^*=0.187$.

2.3.3 M估计的计算

一般的M估计是非线性方程(组)的解,需要迭代计算.

1.位置M估计的计算

位置M估计一般都要有辅助刻度估计,记辅助刻度估计为S_n.位置M估计T_n是方程式(2-20)的解.计算方法有如下几种.

(1) 牛顿法　若ψ可导,记其导数为ψ',则牛顿迭代公式为

$$T_n^{(m+1)}=T_n^{(m)}+S_n\frac{\sum_{i=1}^{n}\psi\left(\frac{X_i-T_n^{(m)}}{S_n}\right)}{\sum_{i=1}^{n}\psi'\left(\frac{X_i-T_n^{(m)}}{S_n}\right)}.$$

(2) 图戈伊法　该方法把T_n在形式上写成加权和,迭代公式为

$$W_i^{(m)}=\frac{\psi\left(\frac{X_i-T_n^{(m)}}{S_n}\right)}{\left(\frac{X_i-T_n^{(m)}}{S_n}\right)},$$

$$T_n^{(m+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} W_i^{(m)} X_i}{\sum_{j=1}^{n} W_j^{(m)}}.$$

(3) 尤伯法　该方法仅用于尤伯 M 估计,迭代公式为

$$A^{(m)} = \{X_i : |X_i - T_n^{(m)}| < KS_n\},$$
$$n_1^{(m)} = \#\{X_i : X_i \leqslant T_n^{(m)} - KS_n\},$$
$$n_2^{(m)} = \# A^{(m)},$$
$$n_3^{(m)} = \#\{X_i : X_i \geqslant T_n^{(m)} + KS_n\},$$
$$\bar{X}^{(m)} = \frac{1}{n_2^{(m)}} \sum_{X_i \in A^{(m)}} X_i,$$
$$T_n^{(m+1)} = \bar{X}^{(m)} + KS_n \frac{n_3^{(m)} - n_1^{(m)}}{n_2^{(m)}},$$

其中 $\# A$ 表示集合 A 中元素的个数.

上述三种算法均在一定条件下收敛到方程式(2-20)的解.其中牛顿法收敛较快,但它要求 ψ 可导.图戈伊法和尤伯法虽比牛顿法收敛慢些,但不需要 ψ 可导.图戈伊法适用面最广,尤伯法仅用于尤伯 M 估计.

初始值的选取也较重要,特别是对图戈伊 M 估计(见表 2-1),相应的方程可能有多个解.通常选样本中位数作为初始值,因为它具有刻度同变性、符号同变性和高崩溃点.

2. 位置 - 刻度 M 估计的计算

这里只讨论 $\xi(t) = (\psi(t))^2 - b$ 的情况.尤伯位置 - 刻度 M 估计对应的 ψ 和 ξ 函数满足

$$\xi_H(t) = (\psi_H(t))^2 - \beta.$$

(1) 牛顿法　迭代公式为

$$T_n^{(m+1)} = T_n^{(m)} + \frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \psi\left(\frac{X_i - T_n^{(m)}}{S_n^{(m)}}\right) S_n^{(m)}}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \psi'\left(\frac{X_i - T_n^{(m)}}{S_n^{(m)}}\right)},$$

$$(S_n^{(m+1)})^2 = \frac{1}{(n-1)b} \sum_{i=1}^{n} \left(\psi\left(\frac{X_i - T_n^{(m)}}{S_n}\right)\right)^2 (S_n^{(m)})^2.$$

(2) 尤伯法　该方法只适用于尤伯M估计.与上述位置M估计的尤伯法类似,记

$$A^{(m)} = \{X_i : |T_n^{(m)} - X_i| < KS_n^{(m)}\},$$
$$n_1^{(m)} = \#\{X_i : X_i \leqslant T_n^{(m)} - KS_n^{(m)}\},$$
$$n_2^{(m)} = \# A^{(m)},$$
$$n_3^{(m)} = \#\{X_i : X_i \geqslant T_n^{(m)} + KS_n^{(m)}\},$$

$$\bar{X}^{(m)} = \frac{1}{n_2^{(m)}} \sum_{X_i \in A^{(m)}} X_i,$$

则有

$$T_n^{(m+1)} = \bar{X}^{(m)} + KS_n^{(m)} \frac{(n_3^{(m)} - n_1^{(m)})}{n_2^{(m)}},$$

$$(S_n^{(m+1)})^2 = \frac{\sum_{X_i \in A^{(m)}} (X_i - \bar{X}^{(m)})^2}{(n-1)\beta - \left(n_1^{(m)} + n_2^{(m)} + \frac{(n_3^{(m)} - n_1^{(m)})^2}{n_2^{(m)}}\right)K^2}.$$

在上面计算 S_n 的迭代公式中,用$(n-1)$代替了 n,这是为了与正态总体时方差的最小方差无偏估计一致.

牛顿法在一定条件下的收敛性已有证明;尤伯法的收敛性尚没有证明,但实际应用表明,在常用的 $1 \leqslant K \leqslant 2$ 的情况下,迭代收敛很快.

3 多元位置和散布阵估计

3.1 M 估 计

3.1.1 多元位置的 M 估计及其合理性

1.定义

定义 1 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\text{i.i.d}}{\sim} F(x)$ 是 p 维样本,w、v 和 s 是定义在 $\mathbf{R}^+$ (即正半轴) 上的非负函数, 则 F 的位置、散布阵泛函 $\boldsymbol{T}(F)$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}(F) = [\boldsymbol{A}(F)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(F)]^{-1}$,由方程组

$$\begin{cases} \int w(|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{t})|)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{t})\mathrm{d}F(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}, \\ \int s(|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{t})|)\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{t})(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{t})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}F(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{I}\int v(|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{t})|)\mathrm{d}F(\boldsymbol{x}) \end{cases} \tag{3-1}$$

的解 $\boldsymbol{t} = \boldsymbol{T}(F)$ 和 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}(F)$ 给出,其中 $|\cdot|$ 表示向量的欧氏模,也表示实数的绝对值,$\boldsymbol{I}$ 是 p 阶单位矩阵.相应的 M 估计 $\boldsymbol{T}_n$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_n = [\boldsymbol{A}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_n]^{-1}$ 则由方程组

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} w(|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}_i-\boldsymbol{t})|)(\boldsymbol{X}_i-\boldsymbol{t}) = \boldsymbol{0}, \\ \sum_{i=1}^{n} s(|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}_i-\boldsymbol{t})|)\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}_i-\boldsymbol{t})(\boldsymbol{X}_i-\boldsymbol{t})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}\sum_{i=1}^{n} v(|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}_i-\boldsymbol{t})|) \end{cases} \tag{3-2}$$

的解

$$t = T_n(\{X_i\}) \xlongequal{\text{def}} T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$$

和

$$A = A_n(\{X_i\}) \xlongequal{\text{def}} A_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$$

给出.

显然方程组式(3-1)可以改写成如下形式：

$$\begin{cases} t = \dfrac{\displaystyle\int w(\| A(x - t) \|) x \mathrm{d}F(x)}{\displaystyle\int w(\| A(x - t) \|) \mathrm{d}F(x)}, \\ [A^{\mathrm{T}}A]^{-1} = \dfrac{\displaystyle\int s(\| A(x - t) \|)(x - t)(x - t)^{\mathrm{T}} \mathrm{d}F(x)}{I \displaystyle\int v(\| A(x - t) \|) \mathrm{d}F(x)}. \end{cases} \tag{3-3}$$

关于样本情况的式(3-2)也可改写成类似于式(3-3)的形式.这种形式的好处是它提供了一种迭代算法(见3.1.3小节).通常取 $v \equiv 1$.关于 w 和 s 的选取,见3.1.2小节.

2.方程组解的存在唯一性

文献[2]分别讨论了在纯位置和纯散布阵情形 $T(F)(T_n(\{X_i\}))$ 和 $\Sigma(F)(\Sigma_n(\{X_i\}))$ 的存在唯一性.这里以实际中要用的式(3-2)为例加以说明.

若 $\Sigma(F)$ 已知,不妨设 $\Sigma(F) = I$.这时只需由 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 估计 $T(F)$.依式(3-2),$T(F)$ 的M估计是方程组

$$\sum_{i=1}^{n} w(\| X_i - t \|)(X_i - t) = 0 \tag{3-4}$$

的解.于是有以下定理.

定理1　若 $w(r)r$ 在 $r > 0$ 时是非降函数,则方程组式(3-4)必有解 T_n;若还存在一个 X_i 和一个解 T_n,使得

$$w(\| X_i - T_n \|) + (X_i - T_n) w'(\| X_i - T_n \|) > 0,$$

则式(3-4)的解是唯一的.

另一方面,若 $T(F)$ 已知,不妨设它为 0,这时只需估计 $\Sigma(F)$,而它的M估计 $\Sigma_n(\{X_i\}) = [A_n^{\mathrm{T}}(\{X_i\})A_n(\{X_i\})]^{-1}$ 由方程组

$$\sum_{i=1}^{n} s(\| AX_i \|) AX_iX_i^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}} = I \sum_{i=1}^{n} v(\| AX_i \|)$$

的解 $A_n(\{X_i\})$ 给出.这时,当 s, v 和数据 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 满足一定条件时,方程组的解存在唯一性.由于这些条件比较复杂,这里从略,感兴趣的读者可参阅文献[2].

当 $T(F)$ 和 $\Sigma(F)$ 都未知,而又需要同时估计时,目前还只有在 F 是椭球等高分布的情况下,才能在一定条件下证明方程组式(3-1)的解存在唯一性(这时 $\Sigma(F)$ 与 F 的协方差阵相差一个倍数,故称之为 F 的拟协方差阵).而对于方程组式(3-2)来说,由于 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 相应的经验分布 F_n 不可能是椭球等高分布,因此,只能得到其解的存在性,尚不能得到唯一性.

3.1.2 主要性质

关于多元位置和散布阵的 M 估计的性质，在文献[1]和[2]中都有讨论，下面只列出一些重要的性质，有些结果的条件比较复杂，这里没有一一列出．

1. 仿射同变性

由式(3-1)定义的 $\boldsymbol{T}(F)$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}(F)$，以及由式(3-2)定义的 M 估计 $\boldsymbol{T}_n(\{\boldsymbol{X}_i\})$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_n(\{\boldsymbol{X}_i\})$ 均具有仿射同变性．实际中要用的是 M 估计，故这里仅叙述 $\boldsymbol{T}_n$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_n$ 的仿射同变性，即对于任何非奇异的 p 阶方阵 $\boldsymbol{B}$ 和向量 $\boldsymbol{b}\in\mathbf{R}^p$，有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{T}_n(\{\boldsymbol{BX}_i+\boldsymbol{b}\}) &= \boldsymbol{BT}_n(\{\boldsymbol{X}_i\})+\boldsymbol{b},\\ \boldsymbol{\Sigma}_n(\{\boldsymbol{BX}_i\}) &= \boldsymbol{B\Sigma}_n(\{\boldsymbol{X}_i\})\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}.\end{aligned}\tag{3-5}$$

2. 影响函数

对于上述定义的 $\boldsymbol{T}(F)$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}(F)$，当 F 为球对称分布(即存在 $\mathbf{R}^+$ 上的非负函数 h，使 F 的密度 $f(\boldsymbol{x})=h(\|\boldsymbol{x}\|)$)时，若 s,u 和 w 满足一些较弱的条件，则可以得到 $\boldsymbol{T}(F)$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}(F)$ 的影响函数

$$\mathrm{IF}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{T},F)=\frac{w(\|\boldsymbol{x}\|)\boldsymbol{x}}{\int\frac{1}{p}w'(\|\boldsymbol{y}\|)\|\boldsymbol{y}\|\mathrm{d}F(\boldsymbol{y})},\tag{3-6}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{IF}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\Sigma},F)=&\frac{(p+2)u(\|\boldsymbol{x}\|)(\boldsymbol{xx}^{\mathrm{T}}/\|\boldsymbol{x}\|^2-\boldsymbol{I}/p)}{\int(u(\|\boldsymbol{y}\|)+u'(\|\boldsymbol{y}\|)\|\boldsymbol{y}\|/p)\mathrm{d}F(\boldsymbol{y})}+\\&\frac{(u(\|\boldsymbol{x}\|)/p-v(\|\boldsymbol{x}\|))\boldsymbol{I}}{\int\|\boldsymbol{y}\|(u'(\|\boldsymbol{y}\|)/p-v'(\|\boldsymbol{y}\|))\mathrm{d}F(\boldsymbol{y})},\end{aligned}\tag{3-7}$$

其中 $u(r)=r^2s(r)$．因此，当 $w(r)r,u(r),v(r)$ 都有界，且上面的两个影响函数中的三个分母都不是 0 时，这两个影响函数有界．

3. 渐近性质

若 F 是椭球等高分布，而且 F,w,u 和 v 满足一定的条件，则 M 估计 $\boldsymbol{T}_n(\{\boldsymbol{X}_i\})$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_n(\{\boldsymbol{X}_i\})$ 具有强相合性，而且 $\sqrt{n}(\boldsymbol{T}_n-\boldsymbol{T}(F))$ 和 $\sqrt{n}(\boldsymbol{\Sigma}_n-\boldsymbol{\Sigma}(F))$ 渐近独立，分别依分布收敛于多元正态分布，渐近方差分别为

$$V(\boldsymbol{T},F)=\int\mathrm{IF}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{T},F)[\mathrm{IF}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{T},F)]^{\mathrm{T}}\mathrm{d}F(\boldsymbol{x}),$$

$$V(\boldsymbol{\Sigma},F)=\int\mathrm{IF}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\Sigma},F)[\mathrm{IF}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\Sigma},F)]^{\mathrm{T}}\mathrm{d}F(\boldsymbol{x}),$$

其中影响函数 $\mathrm{IF}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{T},F)$ 和 $\mathrm{IF}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\Sigma},F)$ 可以由 $\boldsymbol{T}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的仿射同变性和式(3-6)、式(3-7)得到．用经验分布 F_n 代替 F 即可得到 $V(\boldsymbol{T},F)$ 和 $V(\boldsymbol{\Sigma},F)$ 的近似值．

4. 渐近极小化极大性及 w 和 s 的选择

文献[2]证明：如 F 是多元(标准)正态分布，考虑球对称的污染分布，则适当选取 w,v 和 s，相应的 M 估计就是按照渐近方差的渐近极小化极大估计．即 $(\boldsymbol{T}_n,\boldsymbol{\Sigma}_n)$ 在 F 的 ε 的污染邻域中的最大渐近方差在一切 M 估计中达到最小．其中，三个函数的选取分别为

$$v(\cdot) \equiv 1;$$

$$s(r) = \begin{cases} a^2/r^2 & (0 \leqslant r \leqslant a), \\ 1 & (a \leqslant r \leqslant b), \\ b^2/r^2 & (b \leqslant r); \end{cases}$$

而 w 则难以给出精确的显式表达. 由于在多元问题中人们更关心的是散布矩阵, 可以说位置是多余参数, 因此, 尤伯建议取

$$w(r) = \begin{cases} 1 & (r \leqslant r_0), \\ \dfrac{r_0}{r} & (r > r_0). \end{cases}$$

上面的 a, b, r_0 都是与污染比例 ε 及维数 p 有关的常数, 尤伯给出了一些有关的数值结果, 有兴趣的读者可参见文献[2].

5. 崩溃点

上述 M 估计的崩溃点不易直接计算, 但可以证明: 若 F 是中心对称分布(即 $\boldsymbol{X} \sim F$ 满足: 存在 $\boldsymbol{\mu}$ 使 $\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{X}$ 同分布), 则由式(3-1) 定义的 $(\boldsymbol{T}(F), \boldsymbol{\Sigma}(F))$ 的渐近崩溃点 $\varepsilon^* \leqslant 1/(p+1)$. 因此当 $\boldsymbol{X}$ 的维数 p 较高时, 其崩溃点较低.

3.1.3　M 估计的计算

多元位置和散布矩阵的 M 估计可用下面的基本迭代公式计算:

$$\boldsymbol{T}_n^{(m+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} w(|\boldsymbol{A}_n^{(m)}(\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{T}_n^{(m)})|)\boldsymbol{X}_i}{\sum_{j=1}^{n} w(|\boldsymbol{A}_n^{(m)}(\boldsymbol{X}_j - \boldsymbol{T}_n^{(m)})|)}, \tag{3-8}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_n^{(m+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} s(|\boldsymbol{A}_n^{(m)}(\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{T}_n^{(m)})|)(\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{T}_n^{(m)})(\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{T}_n^{(m)})^{\mathrm{T}}}{\sum_{j=1}^{n} v(|\boldsymbol{A}_n^{(m)}(\boldsymbol{X}_j - \boldsymbol{T}_n^{(m)})|)}. \tag{3-9}$$

具体步骤如下:

(1) 确定初始值 $(\boldsymbol{T}_n^{(0)}, \boldsymbol{\Sigma}_n^{(0)})$. 例如, 用样本均值和样本协方差阵作为初始值, 有

$$\boldsymbol{T}_n^{(0)} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\boldsymbol{X}_i}{n}, \quad \boldsymbol{\Sigma}_n^{(0)} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{T}_n^{(0)})(\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{T}_n^{(0)})^{\mathrm{T}}}{(n-1)}.$$

(2) 在有了 $(\boldsymbol{T}_n^{(m)}, \boldsymbol{\Sigma}_n^{(m)})$ $(m = 0, 1, 2, \cdots)$ 之后, 先求下三角矩阵 $\boldsymbol{B}_n^{(m)}$, 使 $\boldsymbol{\Sigma}_n^{(m)} = \boldsymbol{B}_n^{(m)}(\boldsymbol{B}_n^{(m)})^{\mathrm{T}}$, 并计算 $\boldsymbol{A}_n^{(m)} = (\boldsymbol{B}_n^{(m)})^{-1}$.

(3) 用式(3-8)、式(3-9) 和上面的 $\boldsymbol{T}_n^{(m)}$、$\boldsymbol{A}_n^{(m)}$ 计算 $(\boldsymbol{T}_n^{(m+1)}, \boldsymbol{\Sigma}_n^{(m+1)})$.

(4) 反复进行(2) 和(3), 直到某个 k, 使 $|\boldsymbol{T}_n^{(k)} - \boldsymbol{T}_n^{(k-1)}|$ 和 $\|\boldsymbol{\Sigma}_n^{(k)} - \boldsymbol{\Sigma}_n^{(k-1)}\|$ 都不超过预先给定的小数 ε(例如 $\varepsilon = 10^{-3}$) 时为止; 其中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的欧氏模 $\|\boldsymbol{A}\|$ 可取为 $\|\boldsymbol{A}\| = (\mathrm{tr}[\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}])^{1/2}$.

(5) 取 $T_n(\{X_i\}) = T_n^{(k)}, \Sigma_n(\{X_i\}) = \Sigma_n^{(k)}$.

本节的 M 估计虽然有比较完美的理论，但当维数 p 较高时，其崩溃点较低. 下节将介绍几种应用较多的高崩溃点的多元位置和散布矩阵估计.

3.2　高崩溃点估计

3.2.1　最小体积椭球估计(MVE 估计)

1. 定义和计算

设 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\text{i.i.d}}{\sim} F$ 是一个样本量为 n 的 p 维样本，记 $X = \{X_1, X_2, \cdots, X_n\}$ 是由该样本组成的 n 点集，现欲基于 X 估计 F 的位置和散布矩阵. 令

$$K = [n/2]^* + 1,$$

则

$$E(\boldsymbol{\mu}, V) = \{x \in \mathbf{R}^p : (x - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} V^{-1}(x - \boldsymbol{\mu}) \leqslant 1\}$$

是以 $\boldsymbol{\mu}$ 为中心由正定矩阵 V 确定的椭球. 用 det[A] 表示方阵 A 的行列式，求约束极小化问题

$$\begin{cases} \min\limits_{E(\boldsymbol{\mu}, V)} \det(V), \\ \#(X \cap E(\boldsymbol{\mu}, V)) \geqslant K \end{cases}$$

的解 $E_n = E(\boldsymbol{\mu}_n, V_n)$. $E_n = E(\boldsymbol{\mu}_n, V_n)$ 即是所有至少包含 X 的 K 个点的 p 维椭球 $E(\boldsymbol{\mu}, V)$ 中体积最小的($E(\boldsymbol{\mu}, V)$ 的体积 $\propto \det[V]$). 所谓 F 的位置和散布矩阵的最小体积椭球估计(简记为 MVE 估计)，是指

$$T_n = T_n(X) = \boldsymbol{\mu}_n, \quad \Sigma_n = \Sigma_n(X) = cV_n,$$

其中 c 是适当选取的常数(见后)，使得当 F 是 p 维正态分布时，Σ_n 是 F 的协方差阵的相合估计. 该估计是由卢瑟吾(Rousseeuw) 提出的(见文献[3]).

当 n 较大时，实际上不可能对 $\binom{n}{K}$ 个 K 点集中的每一个来计算包含该集的 $E(\boldsymbol{\mu}, V)$ 的体积，并进行比较，而是采用一种近似算法.

假设 X 具有一般位置，即任何一个$(p-1)$ 维超平面上最多有 X 中的 p 个点. 显然，当 F 连续时，该假设以概率 1 成立，因此 X 中的任何一个$(p+1)$ 点集的样本协方差阵都是正定的. 文献[3] 建议采用如下的近似计算方法：

(1) 从 X 中随机抽取$(p+1)$ 个点，记作 $X(1), X(2), \cdots, X(p+1)$.

(2) 计算这$(p+1)$ 个点的样本均值和样本协方差阵 $\overline{X}_1$ 和 V_1，

$$\overline{X}_1 = \frac{\sum\limits_{i=1}^{p+1} X(i)}{p+1},$$

$$V_1 = \frac{\sum\limits_{i=1}^{p+1} (X(i) - \overline{X}_1)(X(i) - \overline{X}_1)^{\mathrm{T}}}{p}.$$

(3) 计算 X 中所有点关于$(\overline{X}_1, V_1)$ 的马氏距离的中位数 m_1,

$$m_1 = [\text{med}\{(X_i - \overline{X}_1)^T V_1^{-1}(X_i - \overline{X}_1): i = 1,2,\cdots,n\}]^{1/2},$$

于是

$$\#\{X_i: (X_i - \overline{X}_1)^T V^{-1}(X_i - \overline{X}_1) \leqslant m_1^2\} \approx \frac{n}{2},$$

(4) 计算目标函数值 $Q(1)$,

$$Q(1) = m_1^p(\det[V_1])^{1/2}.$$

(5) 重复(1) ~ (4) 的计算,得到第二个$(p+1)$点集的样本均值 X_2、样本协方差阵 V_2 和 X 中点关于(X_2, V_2) 的马氏距离的中位数 m_2,以及相应的目标函数值 $Q(2)$.

(6) 比较 $Q(1)$ 和 $Q(2)$,将其中较小的一个记为 $Q(2^*)$,相应的样本均值等记为 $\overline{X}(2^*)$, $V(2^*)$ 和 $m(2^*)$.

(7) 反复进行(5) 和(6) 的计算,直到算得第 N 个 $Q(N^*)$,满足 $|Q(N^*) - Q((N-1)^*)|$ 不大于预先给定的小正数 ε(例如 $\varepsilon = 10^{-4}$)时为止. 于是基于 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的位置和散布矩阵估计可近似地取为

$$T_n = m(N^*), \quad \Sigma_n = \frac{m^2(N^*)V(N^*)}{\chi_p^2(0.5)},$$

其中 $\chi_p^2(0.5)$ 是自由度为 p 的卡方分布的中位数.

2. 主要性质

多元位置和散布阵的 MVE 估计有以下性质:

1° 仿射同变性(见 3.1.2 小节的式(3-5)).

2° 渐近收敛性. 若 F 是单峰的球对称分布,且有密度,则在较弱的条件下可以证明:

(i) 存在(μ_0, Σ_0),使 $n \to \infty$ 时,以概率 1 有$(T_n, \Sigma_n) \to (\mu_0, \Sigma_0)$;

(ii) $(n^{1/3}T_n, n^{1/3}\Sigma_n)$ 依分布收敛到一个非正态分布. 这说明(T_n, Σ_n) 的弱收敛速度是 $n^{-1/3}$.

3° 若 X 具有一般位置,则(T_n, Σ_n) 的替换型样本崩溃点 $\widehat{\varepsilon}_R = ([n/2] - p + 1)/n$. 显然,给定 p,当 $n \to \infty$ 时, $\widehat{\varepsilon}_R \to 1/2$.

由于 MVE 估计具有仿射同变性和较高的崩溃点,实际中有较多的应用,并已被收录在应用较广的统计软件包 SAS/IML(6.12) 中.

3.2.2　基于投影的估计

设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 是来自 F 是一个 p 维样本,欲估计 F 的位置和散布矩阵. 下面介绍两种基于投影的高崩溃点估计.

1. 仿射同变的估计

对于每个观测点 X_i,定义

$$r_i = \sup_{\|a\|=1} \frac{|a^T X_i - \text{med}_j(\{a^T X_j\})|}{\text{MAD}_j(\{a^T X_j\})},$$

用来衡量该点的离群程度，r_i 越大，X_i 越离群. 又 w 是 $\mathbf{R}^+$ 上的连续减函数，且 $w(r)r$ 在 $\mathbf{R}^+$ 上有界. 于是，F 的位置和散布矩阵的估计分别定义为

$$\boldsymbol{T}_n = \frac{\sum_{i=1}^{n} w(r_i)\boldsymbol{X}_i}{\sum_{j=1}^{n} w(r_j)},$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_n = c\sum_{i=1}^{n} \frac{[w(r_i)]^2(\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{T}_n)(\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{T}_n)^{\mathrm{T}}}{\sum_{j=1}^{n}[w(r_j)]^2},$$

其中 c 用来保证当 F 是 p 维正态分布时，估计量 $\boldsymbol{\Sigma}_n$ 相合到 F 的协方差阵. 该估计由多诺霍(Donoho)于1982年提出，它并且研究了$(\boldsymbol{T}_n,\boldsymbol{\Sigma}_n)$的仿射同变性和崩溃点：渐近崩溃点 $\varepsilon^* = \frac{1}{2}$；样本崩溃点与 p 有关，当 $p \geqslant 3$ 时，

$$\hat{\varepsilon}_{\mathrm{R}} = \hat{\varepsilon}_{\mathrm{SR}} = \frac{(n-2p+1)}{(2n-2p+1)}.$$

李国英给出了它的统计泛函，并证明了其定性稳健性. 由于这是最早的多元位置和散布阵的高崩溃点估计，文献中引用较多. 但因为计算量太大，至今未见有应用.

2. 正交同变的估计

如3.1.2节指出，在多元数据分析中，人们更关心的是散布矩阵，位置可以说是多余参数. 李国英和陈忠连(文献[4])基于投影提出的估计主要是针对散布矩阵的.

设 $\hat{m}$ 是一个刻度同变的一维位置稳健估计，通常用样本中位数，$\hat{\sigma}$ 是一个一维的刻度稳健估计，通常用尤伯的M估计. 它们的构造散布矩阵估计的方法是先求稳健主成分. 记 $\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_n)$ 是本节开头所设的来自 F 的独立同分布样本，维数为 p. 对于 $\boldsymbol{a} \in \mathbf{R}^p$，记

$$\hat{m}(\boldsymbol{a}) = \mathrm{med}(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_n),$$

$$\hat{\sigma}(\boldsymbol{a}) = \hat{\sigma}(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_1 - \hat{m}(\boldsymbol{a}),\cdots,\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_n - \hat{m}(\boldsymbol{a})).$$

定义

$$\hat{\lambda}_1(\boldsymbol{X}) = \max_{|\boldsymbol{a}|=1}\hat{\sigma}(\boldsymbol{a}),$$

$$\hat{\boldsymbol{a}}_1(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{a}_1, \text{若 } |\boldsymbol{a}_1| = 1, \hat{\lambda}_1(\boldsymbol{X}) = \hat{\sigma}(\boldsymbol{a}_1);$$

$$\hat{\lambda}_2(\boldsymbol{X}) = \max_{|\boldsymbol{a}|=1,\boldsymbol{a}\perp\boldsymbol{a}_1}\hat{\sigma}(\boldsymbol{a}),$$

$$\hat{\boldsymbol{a}}_2(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{a}_2, \text{若 } |\boldsymbol{a}_2| = 1, \boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_1, \hat{\lambda}_2(\boldsymbol{X}) = \hat{\sigma}(\boldsymbol{a}_2);$$

$$\vdots$$

$$\hat{\lambda}_p(\boldsymbol{X}) = \hat{\sigma}(\boldsymbol{a}_p),\ |\boldsymbol{a}_p| = 1, \boldsymbol{a}_p \perp \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_{p-1},$$

$$\hat{\boldsymbol{a}}_p(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{a}_p.$$

散布矩阵的估计定义为

$$\boldsymbol{\Sigma}_n(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{\Sigma}_n(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_n) = \sum_{i=1}^{p}(\hat{\lambda}_i(\boldsymbol{X}))^2\hat{\boldsymbol{a}}_i(\boldsymbol{X})(\hat{\boldsymbol{a}}_i(\boldsymbol{X}))^{\mathrm{T}}.$$

该 $\boldsymbol{\Sigma}_n(\boldsymbol{X})$ 是正交同变的，即对于任何 p 阶正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$，

$$\boldsymbol{\Sigma}_n(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{Q}\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{Q}\boldsymbol{X}_n) = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Sigma}_n(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_n)\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}},$$

但不是仿射同变的. 其渐近崩溃点 $\varepsilon^* = 1/2$，样本崩溃点与维数 p 无关，是 $\hat{m}$ 和 $\hat{\sigma}$ 的样本崩溃点中较小者. 当 F 是椭球等高分布时，$\{\boldsymbol{\Sigma}_n\}$ 在 F 处定性稳健，强相合，而且有渐近正态性，收敛速度为 $n^{-1/2}$.

刻度 M 估计的计算并不难(参见 2.3.3 小节)，计算上述估计量的难点在于求出单位球面上的极点. 这可用以下两种近似计算方法：

(1) 随机抽样法　即从单位球面上的均匀分布中抽取一个较大的样本 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_N$，则近似地有 $\max\limits_{\|\boldsymbol{a}\|=1}\hat{\sigma}(\boldsymbol{a}) \approx \max\limits_{1\le j\le N}\hat{\sigma}(\boldsymbol{b}_j)$. 顺便指出，如果 $\boldsymbol{Z} \sim N_K(0,\boldsymbol{I})$($K$ 维标准正态分布)，则 $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{Z}/\|\boldsymbol{Z}\|$ 服从 K 维单位球面上的均匀分布. 应该指出，求 $\hat{\lambda}_1(\boldsymbol{X}),\hat{\boldsymbol{a}}_1(\boldsymbol{X})$ 时，是在 p 维单位球面上求极值；而在有了 $\hat{\lambda}_i(\boldsymbol{X}),\hat{\boldsymbol{a}}_i(\boldsymbol{X}), i = 1,2,\cdots,d$ 之后，求 $\hat{\lambda}_{d+1}(\boldsymbol{X}),\hat{\boldsymbol{a}}_{d+1}(\boldsymbol{X})$ 时，实际是在 $p-d$ 维单位球面上求极值.

(2) 数论布点法　即用数论方法在单位球面上均匀布点，给出 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_N$. 数论布点的方法可参见方开泰、王元(1993) 编写的 Number-Theoretic Methods in Statistics. 该估计方法同时给出了稳健主成分的估计和稳健的散布矩阵估计，既可以用于主成分分析，也可以用于其他基于散布矩阵的多元数据分析，在我国气象和医疗等领域有较多应用.

3.2.3　最小体积椭球估计及基于投影的估计的应用

1. 用于离群点剔出

在一维和二维情况，很容易用图形方法找出离群点. 维数较高时，无法作图，通常用马氏距离来判断离群点. 但由于样本均值 $\overline{\boldsymbol{X}}$ 和样本协方差阵 $\boldsymbol{S}_n$ 稳健性很差，因此，由此构造的马氏距离 $(\boldsymbol{X}_i - \overline{\boldsymbol{X}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_n^{-1}(\boldsymbol{X}_i - \overline{\boldsymbol{X}})$ 也不稳健. 用马氏距离的大小作为判断离群点的依据并不可靠. 用全样本的马氏距离与丢掉一点后的马氏距离的变化大小也难以较准确地判断离群值. 因为当有多个彼此十分接近的离群点时，丢掉其中一个后马氏距离的变化很小. 这与回归问题中的离群值问题类似，可参阅 4.1 节.

如采用高崩溃点的估计方法，则少量离群点对位置和散布矩阵估计基本不起作用，估计量 $(\boldsymbol{T}_n,\boldsymbol{\Sigma}_n)$ 主要由多数非离群的样本观测值决定. 因此对离群点 $\boldsymbol{X}^*$ 而言，自然有 $(\boldsymbol{X}^* - \boldsymbol{T}_n)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_n^{-1}(\boldsymbol{X}^* - \boldsymbol{T}_n)$ 的值大，从而很容易将之识别出来.

2. 用于稳健多元分析

许多基于协方差阵的多元分析方法，可以通过用散布矩阵的稳健估计代替协方差阵的方法而使其稳健化，例如主成分分析、判别分析、因子分析、典型相关分析

等.当然,3.2.2小节的2.的方法是先求出主成分的估计,故可直接用于主成分分析.

虽然在上述的三种高崩溃点估计中,最小体积椭球估计和基于投影的正交同变估计应用较多,但最近的研究表明,最小体积椭球估计虽然具有高崩溃点,但它在假定模型的污染邻域中的偏差较大,特别是污染比例较大(例如20%)时.因此使用时需要注意这一点.而基于投影的估计在污染邻域中的偏差要小得多,但其缺点是只有正交同变性,没有仿射同变性.

总之,多元位置和散布矩阵的稳健估计还有待于发展、完善.

4 稳健回归

4.1 最小二乘估计与离群值

4.1.1 最小二乘估计

假定线性模型

$$y = x^{\mathrm{T}}\beta + \varepsilon, \tag{4-1}$$

其中 x 和 β 是 p 维向量;T表示向量或矩阵的转置;随机误差 ε 的方差有穷,密度函数 f 是对称、单峰的,分布函数为 F;解释变量 x 可能是随机的,协方差阵正定有穷,且与 ε 独立,也可能是非随机的.设有观测数据 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$ $(n > p)$ 使得 $\varepsilon_i = y_i - x_i^{\mathrm{T}}\beta$, $i = 1, 2, \cdots, n$,独立同分布,现欲估计未知参数 β.

设 $X = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^{\mathrm{T}}$ 是 $n \times p$ 矩阵,$Y = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}}$ 是 n 维向量,并假定 X 是满秩矩阵,则 β 的最小二乘估计(简记为LS估计)为

$$\hat{\beta}_{\mathrm{LS}} = [X^{\mathrm{T}}X]^{-1}X^{\mathrm{T}}Y.$$

响应变量 Y 的拟合量(也称回归值)为

$$\hat{Y} = X\hat{\beta}_{\mathrm{LS}} = X[X^{\mathrm{T}}X]^{-1}X^{\mathrm{T}}Y \xlongequal{\mathrm{def}} HY,$$

其中 $H = X[X^{\mathrm{T}}X]^{-1}X^{\mathrm{T}} \xlongequal{\mathrm{def}} [h_{ij}]_{n\times n}$ 称为帽子矩阵.因它是投影矩阵,故有 $0 \leqslant h_{ii} \leqslant 1$, $h_{ij}^2 \leqslant h_{ii}$.残差向量为

$$r = Y - \hat{Y} = (I - H)Y = (r_1, r_2, \cdots, r_n)^{\mathrm{T}},$$

其中 I 是单位距阵.通常用 r_i 的大小衡量点 (x_i, y_i) 到回归直线 $\hat{y} = x^{\mathrm{T}}\hat{\beta}_{\mathrm{LS}}$ 的远近程度,并判断该点是否离群值.这种方法有时会产生误导,详见下一节.

4.1.2 残差与离群值

响应值 y_i 的回归值为

$$\widehat{y}_i = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}]^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Y} = \sum_{j=1}^{n} h_{ij}y_j,$$

相应的残差为

$$r_i = y_i - \widehat{y}_i = (1 - h_{ii})y_i - \sum_{j\neq i} h_{ij}y_j. \tag{4-2}$$

如果有一个响应值(例如 y_1) 是离群值,即本应是 y_1,但进行回归估计时用了 $\widetilde{y}_1 = y_1 + \Delta$,设其他诸观测值均无变化,这时 $\boldsymbol{H}$ 没有任何变化,但由于 y_1 变了,诸残差 r_i 也随之变化,从 r_i 变到 $\widetilde{r}_i = r_i + \delta_i$. 按照式(4-2) 可知,

$$\widetilde{r}_1 = (1 - h_{11})\widetilde{y}_1 - \sum_{j\neq 1} h_{1j}y_j = r_1 + (1 - h_{11})\Delta,$$

$$\widetilde{r}_i = (1 - h_{ii})y_i - h_{i1}\widetilde{y}_1 - \sum_{\substack{j\neq i\\ j\neq 1}} h_{ij}y_j = r_i - h_{i1}\Delta \qquad (i \neq 1).$$

因此,诸 r_i 的改变分别为

$$\delta_1 = (1 - h_{11})\Delta,$$

$$\delta_i = - h_{i1}\Delta \qquad (i \neq 1).$$

可见,如果 h_{11} 比较接近 1,$(1 - h_{11})$ 较小,则有可能 $|-h_{i1}| > (1 - h_{11})$. 这时 δ_1 较小,且

$$|\delta_i| > |\delta_1|.$$

这说明,当 $\widetilde{y}_1$ 是响应变量的离群值时,它相应的残差 r_1 并不见得大,有可能另外的残差 $r_i(i \neq 1)$ 反而比 r_1 大,因此用残差大作为离群值的判断标准是不可靠的.

上述 h_{ii} 的大小反映了 $\boldsymbol{x}_i$ 与诸 $\boldsymbol{x}_j$ 的"距离", h_{ii} 大时, $\boldsymbol{x}_i$ 与其他 $\boldsymbol{x}_j(j \neq i)$ 相距较远. 在回归诊断中,称 h_{ii} 大的点$(\boldsymbol{x}_i, y_i)$ 为杠杆点(leverage point). 下一节,将进一步讲述 h_{ii} 的作用,以及基于 LS 估计作回归诊断的缺点.

4.1.3 单点对 LS 回归的影响

可以用丢掉一个点$(\boldsymbol{x}_i, y_i)$ 时回归结果的改变情况,来衡量该点对回归的影响. 用 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}}(i)$ 表示丢掉$(\boldsymbol{x}_i, y_i)$ 后 $\boldsymbol{\beta}$ 的 LS 估计, $\widehat{y}_j(i)$ 表示相应的 y_j 的回归值,经过代数运算,可得

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}} - \widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}}(i) = \frac{r_i}{1 - h_{ii}}[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}]^{-1}\boldsymbol{x}_i,$$

$$\widehat{y}_j - \widehat{y}_j(i) = \frac{h_{ji}r_i}{1 - h_{ii}}.$$

以 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计为例,由上面的结果可知, h_{ii} 接近 1 时,丢掉$(\boldsymbol{x}_i, y_i)$ 有可能使 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计发生较大的变化,特别是当 r_i 大时. 回归诊断中常用 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}} - \widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}}(i)$ 来判断"离群值"(这里常称为"影响点"),这虽然比只用残差判断进了一步,但其实也不一定可靠. 图4-1所示的示意图可以很直观地说明这个问题. 在图4-1(a)中, A 点是杠杆

点，但 A 与其他各点几乎在同一直线上，因此它的残差几乎是 0；丢掉 A 点，$\boldsymbol{\beta}$ 的估计变化很小. 在图 4-1(b) 中，B_1 点是杠杆点，也是离群点，而 B_1 以外的各点几乎在一条远离该点的直线上；B_1 的残差并不大，相反 B_2 点的残差却相对比较大；但如果丢掉 B_1 点，则 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计会有大的改变，由此可以判断 B_1 是离群点. 图 4-1(c) 所示的情况与图 4-1(b) 所示的相似，但由于有两个离群的杠杆点 C_1 和 C_2，丢掉其中一个点时，$\boldsymbol{\beta}$ 的估计变化不会大，因此无法根据丢掉一个点后 $\boldsymbol{\beta}$ 估计值的变化来判断这两个点的离群性. 这种现象在回归诊断中叫做"遮掩"(masking).

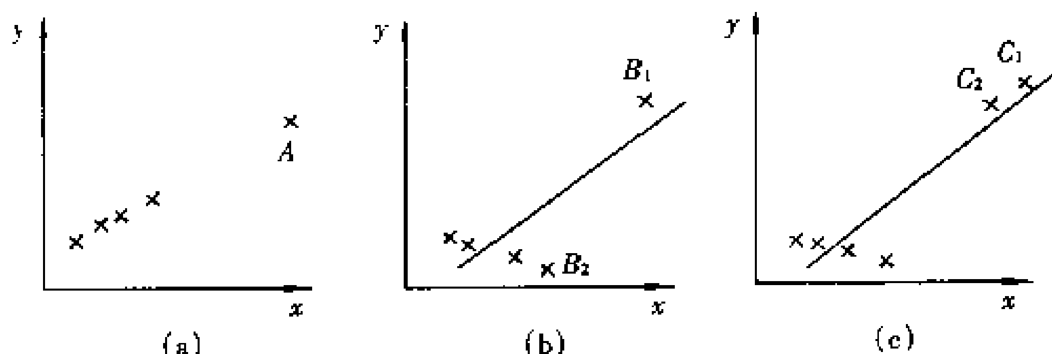


图 4-1

总之，在 LS 估计的基础上来判断所建立的模型与数据的符合情况和寻找离群值有时会出错. 其根本原因在于 LS 估计本身不稳健，少数来自 $\boldsymbol{x}$ 或 y 的离群点对它的影响都很大.

4.1.4　LS 估计的不稳健性

下面通过 LS 估计的影响函数和崩溃点来说明 LS 估计的不稳健性.

设 $\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_n \overset{\text{i.i.d}}{\sim} H(\boldsymbol{x})$（分布函数），协方差阵正定且有穷，$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n \overset{\text{i.i.d}}{\sim} F(\boldsymbol{x})$，关于 F 和其他假定如 4.1.1 小节所述. 于是在模型式(4-1)下，$(\boldsymbol{x}_1, y_1), \cdots, (\boldsymbol{x}_n, y_n)$ 独立同分布，其联合分布为

$$G(\boldsymbol{x}, y) = F(y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})H(\boldsymbol{x}).$$

易知 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}}$ 的统计泛函(记为 $\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{LS}}$) 是方程 $\int (y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{x}\mathrm{d}G(\boldsymbol{x}, y) = \mathbf{0}$ 的解，$\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{\beta}_{\mathrm{LS}}(G)$，它在 G 处的影响函数为

$$\mathrm{IF}((\boldsymbol{x}, y), \boldsymbol{\beta}_{\mathrm{LS}}, G) = (y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{LS}}(G))\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{x},$$

其中 $\boldsymbol{B} = \int \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}H(\boldsymbol{x})$ 是正定矩阵. 显然这个影响函数是无界的，而且残差部分 $(y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{LS}}(G))$ 和由解释变量 $\boldsymbol{x}$ 确定的部分 $\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{x}$ 都是无界的. 因此，无论是响应变量 y 还是解释变量 $\boldsymbol{x}$ 的观测数据受到污染，都可能对 LS 估计有很大影响. $\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{LS}}$ 的渐近崩溃点

$$\varepsilon^*(\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{LS}}) = 0,$$

三种样本崩溃点分别为

$$\widehat{\varepsilon}_{\mathrm{A}}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}}) = \frac{1}{(n+1)}, \quad \widehat{\varepsilon}_{\mathrm{R}}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}}) = \widehat{\varepsilon}_{\mathrm{SR}}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LS}}) = \frac{1}{n}.$$

4.2 M估计和GM估计

4.2.1 误差刻度已知时的M估计和W估计

1. 定义 沿用上节中的记号. 模型式(4-1)中 $\boldsymbol{\beta}$ 的M估计定义为极小化问题

$$\sum_{i=1}^{n}\rho(y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}) = \min_{\boldsymbol{\beta}}\sum_{i=1}^{n}\rho(y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})$$

的解 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}$. 一般地,$\rho$ 是对称的凸函数,除个别点外处处可导. 常用的 ρ 函数如第2章中表2-1所示. 令 $\psi = \rho'$(见表2-1),则上面的定义等价于

$$\sum_{i=1}^{n}\psi(y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{x}_i = 0, \tag{4-3}$$

以后主要用这个定义.

沿用4.1.4小节中的记号,则 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}$ 的统计泛函是方程组 $\int\psi(y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{x}\mathrm{d}G(\boldsymbol{x},y) = \mathbf{0}$ 的解 $\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{M}} = \boldsymbol{\beta}_{\mathrm{M}}(G)$. 与位置M估计类似,令

$$W(t) = \frac{\psi(t)}{t},$$

$$W_i(\boldsymbol{\beta}) = \frac{\psi(y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})}{y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}},$$

则式(4-3)可改写为

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})W_i(\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{x}_i = \mathbf{0}.$$

定义对角矩阵 $\boldsymbol{W} = \mathrm{diag}(W_1(\boldsymbol{\beta}), W_2(\boldsymbol{\beta}), \cdots, W_n(\boldsymbol{\beta}))$,则上式变成

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{Y}. \tag{4-4}$$

上式形式上是加权最小二乘的正规方程,但权 $\boldsymbol{W}$ 是依赖于参数 $\boldsymbol{\beta}$ 的. 由式(4-4)定义的 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计称为W估计,记为 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{W}}$. 它实际上是M估计,即 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}} = \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{W}}$. 但W估计提供了一种计算方法(见后).

2. M估计的主要性质

在较弱的条件下,可以证明 $\boldsymbol{\beta}$ 的M估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}$ 有以下性质:

1° 若解释变量 $\boldsymbol{x}$ 是非随机的,则有

$$[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}]^{1/2}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}} - \boldsymbol{\beta}) \xrightarrow{\mathrm{d.}} N(0, A\boldsymbol{I}) \qquad (n \to \infty),$$

其中 $A = \{E\psi^2(\epsilon)/(E\psi'(\epsilon))^2\}$,$\boldsymbol{I}$ 是单位矩阵. 若 $\boldsymbol{x}$ 是随机的(见4.1.4小节),则

$$\sqrt{n}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}} - \boldsymbol{\beta}) \xrightarrow{\mathrm{d.}} N(0, \boldsymbol{V}),$$

其中

$$\boldsymbol{V} = \boldsymbol{B}_{\psi}^{-1}\boldsymbol{Q}_{\psi}\boldsymbol{B}_{\psi}^{-1};$$

$$\boldsymbol{B}_{\psi} = \int\psi'(y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{M}}(G))\,\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}G(\boldsymbol{x}, y)$$

是正定矩阵;

$$Q_{\psi} = \int \psi^2(y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{M}}(G))\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}G(\boldsymbol{x}, y)$$

也是正定矩阵.大多数时候 $\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{M}}(G)$ 就是真值 $\boldsymbol{\beta}$,这时

$$\boldsymbol{\beta}_{\psi} = E\psi'(\varepsilon)\int \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}H(\boldsymbol{x}),$$

$$\boldsymbol{Q}_{\psi} = E\psi^2\int \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}H(\boldsymbol{x}),$$

$$\boldsymbol{V} = A\left[\int \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}H(\boldsymbol{x})\right]^{-1}.$$

2° M 估计 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}$ 的影响函数

$$\mathrm{IF}((\boldsymbol{x}, y), \boldsymbol{\beta}_{\mathrm{M}}, G) = \psi(y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{M}}(G))\, B_{\psi}^{-1}\boldsymbol{x}.$$

3° $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}$ 的渐近崩溃点 $\varepsilon^* = 0$.

利用性质 1°,可以求 $\boldsymbol{\beta}$ 的置信域或对 $\boldsymbol{\beta}$ 进行检验,但需要估计 A.当 $\boldsymbol{x}$ 为随机向量时,还要估计 $\int \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}H(\boldsymbol{x}) \xlongequal{\mathrm{def}} C'$.显然可取

$$\widehat{C'} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} = \frac{1}{n}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}.$$

记 $r_i = y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}$ 是回归 M 估计的残差,则可用下面的 $\widehat{A}$ 作为 A 的估计:

$$\widehat{A} = \frac{\dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\psi(r_i))^2}{\left(\dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\psi'(r_i)\right)^2},$$

于是当 n 较大时,无论 $\boldsymbol{x}$ 是否随机都可以近似地认为

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}} - \boldsymbol{\beta} \sim N(0, [\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}]^{-1}\widehat{A}),$$

从而可以构造 $\boldsymbol{\beta}$ 的置信域或进行检验.

由性质 2° 可知,$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}$ 的影响函数无界.因为即使 ψ 是有界函数,能使残差决定的部分 $\psi(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{M}})$ 有界,但由 $\boldsymbol{x}$ 决定的部分仍然无界.这就是说,如果对数据的污染只发生在响应变量 y 上,则 ψ 有界时 M 估计不会受大的影响.但如果发生在解释变量 $\boldsymbol{x}$ 上,则 M 估计仍会受到很大影响.性质 2° 和 3° 表明,回归的 M 估计稳健性仍然不够好.上述内容都假定误差刻度已知,但实际上误差刻度一般是未知的,也需要估计;而且除了 LS 估计和 L_1 估计(参见表 2-1 中相应的 ψ 函数)以外,回归的 M 估计一般没有人们所希望的刻度、符号、仿射和回归的同变性.通过估计误差刻度可以获得这些同变性.

4.2.2 误差刻度未知时的 M 估计

当误差刻度未知时,M 估计有两种办法:一是预先估计误差刻度,进而估计 $\boldsymbol{\beta}$;二是同时估计 $\boldsymbol{\beta}$ 和误差刻度.

预先估计误差刻度是指先初步估计 $\boldsymbol{\beta}$,记作 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_0$,再由该初始估计得到的残差给出误差刻度的估计,进而估计 $\boldsymbol{\beta}$.常用的 $\boldsymbol{\beta}$ 的初始估计是不受刻度影响又有一定的稳健性的 L_1 估计($\psi(t)=\text{sgn}(t)$ 时的回归 M 估计),即取 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{L_1}$,然后由关于 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)}$ 的残差 $r_i^{(0)}=y_i-\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)}$ 用 MAD 来估计误差刻度 σ,即

$$\widehat{\sigma}=\frac{\operatorname*{med}_i\{|r_i^{(0)}-\operatorname*{med}_j\{r_j^{(0)}\}|\}}{0.6745}. \tag{4-5}$$

有了估计量 $\widehat{\sigma}$,再求解方程组

$$\sum_{i=1}^{n}\psi\left(\frac{y_i-\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}}{\widehat{\sigma}}\right)\boldsymbol{x}_i=\mathbf{0}, \tag{4-6}$$

得到 $\boldsymbol{\beta}$ 的 M 估计 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}$.这时

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}((\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_n,y_n))\xlongequal{\text{def}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}(\{(\boldsymbol{x}_i,y_i)\})$$

具有和 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)}(\{(\boldsymbol{x}_i,y_i)\})$ 一样的同变性:

1° 刻度同变性　对于任何 $c\geqslant 0$,

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}(\{(\boldsymbol{x}_i,cy_i)\})=c\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}(\{(\boldsymbol{x}_i,y_i)\});$$

2° 符号同变性　$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}(\{(\boldsymbol{x}_i,-y_i)\})=-\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}(\{(\boldsymbol{x}_i,y_i)\})$;

3° 仿射同变性　对于任何 $p\times p$ 非奇矩阵 $\boldsymbol{A}$,

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}(\{(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i,y_i)\})=\boldsymbol{A}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}(\{(\boldsymbol{x}_i,y_i)\});$$

4° 回归同变性　对于任何 $\boldsymbol{\alpha}\in\mathbf{R}^p$,有

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}(\{(\boldsymbol{x}_i,y_i+\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha})\})=\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}(\{(\boldsymbol{x}_i,y_i)\})+\boldsymbol{\alpha}.$$

求解方程组式(4-6)的方法有如下三种:

牛顿法　从第 m 步到第$(m+1)$步的迭代公式是

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m+1)}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)}+\widehat{\sigma}\left[\sum_{i=1}^{n}\psi'\left(\frac{y_i-\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)}}{\widehat{\sigma}}\right)\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\right]^{-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\psi\left(\frac{y_i-\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)}}{\widehat{\sigma}}\right)\boldsymbol{x}_i\right).$$

尤伯法　迭代公式是

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m+1)}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)}+\widehat{\sigma}[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}]^{-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\psi\left(\frac{y_i-\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)}}{\widehat{\sigma}}\right)\boldsymbol{x}_i\right).$$

图戈伊法　由 M 估计的等价形式 W 估计可以得到如下迭代算法.记

$$W_i^{(m)}=\frac{\psi((y_i-\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)})/\widehat{\sigma})}{(y_i-\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)})/\widehat{\sigma}},$$

$$\boldsymbol{W}^{(m)}=\text{diag}(W_1^{(m)},W_2^{(m)},\cdots,W_n^{(m)}),$$

则迭代公式为

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m+1)} = [\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{(m)}\boldsymbol{X}]^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{(m)}\boldsymbol{Y}.$$

文献中也称该方法为“迭代变权最小二乘”(iteratively reweighted least squares)法.

显然,牛顿法要求 ψ 可导,其他两种方法不要求这一条件. 尤伯法的优点是只须计算一次 $[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}]^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$;而图戈伊法每次都要重新计算 $(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{(m)}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{(m)}$. 但有了这一矩阵之后,图戈伊法可以利用原有的加权最小二乘的计算程序.

此外,在求解 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{L}_1}$ 时,也可用上面的尤伯法和图戈伊法,只是在上述相应公式中取 $\psi(t) = \mathrm{sgn}(t), \widehat{\sigma} = 1$. 有了 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)}$ 即可由式(4-5)求出 $\widehat{\sigma}$.

回归系数 $\boldsymbol{\beta}$ 和误差刻度 σ 的同时 M 估计可以通过求解如下方程组得到:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n}\psi\left(\dfrac{y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}}{\sigma}\right)\boldsymbol{x}_i = 0, \\ \sum_{i=1}^{n}\chi\left(\dfrac{y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}}{\sigma}\right) = a, \end{cases} \tag{4-7}$$

其中 ψ 函数和相应的 ρ 函数见表 2-1;χ 函数通常取为

$$\chi(t) = t\psi(t) - \rho(t), \quad a = (n-p)\int\chi(x)\phi(x)\mathrm{d}x,$$

其中 p 是 $\boldsymbol{x}_i$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 的维数,ϕ 是标准正态的密度函数. 求解该方程组的迭代公式为

$$[\widehat{\sigma}^{(m+1)}]^2 = \frac{1}{a}\sum_{i=1}^{n}\chi\left(\frac{y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)}}{\widehat{\sigma}^{(m)}}\right)(\widehat{\sigma}^{(m)})^2,$$

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m+1)} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)} + \widehat{\sigma}^{(m)}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\sum_{i=1}^{n}\psi\left(\frac{y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{M}}^{(m)}}{\widehat{\sigma}^{(m)}}\right)\boldsymbol{x}_i.$$

尤伯等已经证明:如取 ψ 和 ρ 函数为尤伯的 ψ_{H} 和 ρ_{H},则在较弱的条件下上式迭代公式收敛到方程组式(4-7)的解,而且与初始值无关. 因此原则上说,LS 估计或 L_1 估计均可作为初始值.

4.2.3 有界影响回归(GM 估计)

如前所述,回归的 M 估计稳健性仍不够好,故仍需要稳健性更好的方法,首先是影响函数有界的方法. 文献中有好几种有界影响回归法,这里只介绍以后要用到的一种.

回归 M 估计的影响函数无界,主要问题出在解释变量 $\boldsymbol{x}$ 部分,因此要得到有界影响的回归估计就要对 $\boldsymbol{x}$ 也加上适当的权,即当 $\boldsymbol{x}_i$ 离其他 $\boldsymbol{x}_j$ 较远时,给它一个小权. 为简单起见,仍先考虑误差刻度已知为 1 的情况. 有界影响回归的一般形式是求解方程组

$$\sum_{i=1}^{n}\eta(\boldsymbol{x}_i, y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{x}_i = 0,$$

得到 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{GM}}$,通常称之为广义 M 估计,简记作 GM 估计. 其中 η 是定义在 $\mathbf{R}^p \times \mathbf{R}$ 上的实值函数. GM 估计的统计泛函是方程组

$$\int \eta(\boldsymbol{x}, y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{x}\mathrm{d}G(\boldsymbol{x}, y) = 0$$

的解(同前，G 是 $(\boldsymbol{x}, y)$ 的联合分布)．记 $\eta'(\boldsymbol{x}, r) = \frac{\partial}{\partial r}\eta(\boldsymbol{x}, r)$，则由上面的泛函方程可以得到 GM 估计的影响函数为

$$\mathrm{IF}((\boldsymbol{x}, y), \boldsymbol{\beta}_{\mathrm{GM}}, G) = \eta(\boldsymbol{x}, y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{GM}}(G))\, \boldsymbol{B}_{\mathrm{GM}}^{-1}\boldsymbol{x}, \tag{4-8}$$

其中 $\boldsymbol{B}_{\mathrm{GM}} = \int \eta'(\boldsymbol{x}, y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{GM}}(G))\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}G(\boldsymbol{x}, y)$．在较弱的条件下，一般能使 $\boldsymbol{B}_{\mathrm{GM}}$ 是正定矩阵，因此适当选取 η，使 $\eta(\boldsymbol{x}, y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{x}$ 是有界的，则影响函数式(4-8)就有界了．例如，取 ψ 为有界函数，取

$$\eta(\boldsymbol{x}, y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}) = \sqrt{1 - h_{ii}}\,\psi\left(\frac{y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}}{\sqrt{1 - h_{ii}}}\right),$$

其中 h_{ii} 是4.1.1小节中帽子矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的对角元，不难验证 $\sqrt{1 - h_{ii}}\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^p$ 上是有界的，从而由该 η 定义的 GM 估计的影响函数有界．

回归 GM 估计的主要性质如下：

1° 在一定条件下估计量是相合的，并有渐近正态性．具体地说，沿用4.1.4小节的记号，令

$$\boldsymbol{Q}_\eta = \int \eta^2(\boldsymbol{x}, y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}_{\mathrm{GM}}(G))\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}G(\boldsymbol{x}, y),$$

$$\boldsymbol{V} = \boldsymbol{B}_{\mathrm{GM}}^{-1}\boldsymbol{Q}_\eta\boldsymbol{B}_{\mathrm{GM}}^{-1},$$

则

$$\sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{GM}} - \boldsymbol{\beta}) \xrightarrow{\mathrm{d.}} N(0, \boldsymbol{V}).$$

2° 影响函数如式(4-8)所给出．

3° 关于回归 GM 估计的崩溃点，情况比较复杂，但关于其渐近崩溃点有以下结论：

(i) 若 $\sup\limits_{\boldsymbol{x}}\sup\limits_{r} |\eta(\boldsymbol{x}, r)| = \infty$，则 $\varepsilon^* = 0$；

(ii) 若 $\sup\limits_{\boldsymbol{x}}\sup\limits_{r} |\eta(\boldsymbol{x}, r)| < \infty$，则 $\varepsilon^* > 0$；

(iii) $\varepsilon^* \leqslant 1/p \to 0 \quad (p \to \infty)$．

可以说，回归GM估计的主要缺点是崩溃点低，特别是当参数 $\boldsymbol{\beta}$ 的维数较高时．

还应说明，由于误差刻度 σ 一般都是未知的，因此在回归的 GM 估计中也需估计 σ．一般采取预先估计的方法，具体做法与求 M 估计时的做法相同，这里从略．

4.3　高崩溃点高效率估计

4.3.1　高崩溃点估计

高崩溃点是稳健性的重要内容，在探索性数据分析中尤其重要．此外，作为迭代计算中的初始估计或辅助估计，高崩溃点也是十分重要的．由于 M 估计和 GM 估计的崩溃点都较低，文献中关于回归的高崩溃点估计有很多讨论，这里仅介绍比较

重要也比较实用的一类方法，即最小切尾平方和(least trimmed sum of squares)估计，简记为LTS估计.

令 $r_i(\boldsymbol{\beta}) = y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}$，对于每个给定的 $\boldsymbol{\beta}$，将 $r_i^2(\boldsymbol{\beta})$ 从小到大排列成 $(r^2(\boldsymbol{\beta}))_{(1)} \leqslant (r^2(\boldsymbol{\beta}))_{(2)} \leqslant \cdots \leqslant (r^2(\boldsymbol{\beta}))_{(n)}$. 设 $k \leqslant n$ 是一个自然数，则称极小化问题

$$\sum_{i=1}^{k}(r^2(\boldsymbol{\beta}))_{(i)} = \min_{\boldsymbol{\beta}}\sum_{i=1}^{k}(r^2(\boldsymbol{\beta}))_{(i)} \tag{4-9}$$

的解为一个LTS估计，记为 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$.

LTS估计的主要性质如下：

1° $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$ 具有刻度、符号、仿射和回归同变性(见4.2.1小节).

2° 适当选取 k，可使 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$ 具有较高的崩溃点. 例如当 $k = [n/2]^* + 1$ 时，其样本崩溃点

$$\widehat{\varepsilon}_{\mathrm{R}} = \widehat{\varepsilon}_{\mathrm{SR}} = \frac{[n/2]^* - p + 2}{n};$$

当 $k = [n/2]^* + [(p+1)/2]^*$ 时，

$$\widehat{\varepsilon}_{\mathrm{R}} = \widehat{\varepsilon}_{\mathrm{SR}} = \frac{[(n-p)/2]^* + 1}{n}.$$

关于 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$ 的其他性质，文献中仅讨论了在位置参数(即 $p = 1$)这一特殊情况下 $\sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}} - \boldsymbol{\beta})$ 的渐近正态性和 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$ 的影响函数(参见文献[3])，这对于回归问题不具有一般性，故这里从略.

$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$ 的缺点是稳健性和估计精度(效率)不能兼顾. 这从直观上也能看出：切尾切得多(k 较小)时稳健性好，但效率不高；切得少(k 较大)效率能提高，但稳健性就变差了.

4.3.2 LTS估计的计算

计算 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$，需要求出极小化问题式(4-9)的解. 这要用到 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$ 的精确拟合性这一性质.

1. 精确拟合性

定理1 如果存在 $\widetilde{\boldsymbol{\beta}}$ 使得在 $(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \cdots, (\boldsymbol{x}_n, y_n)$ 中有 $d > (n+p-1)/2$ 个点满足方程 $y = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\widetilde{\boldsymbol{\beta}}$，而且这 d 个点具有一般位置(见3.2.1小节)，则无论其他 $n-d$ 个点是什么，基于 $(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \cdots, (\boldsymbol{x}_n, y_n)$ 的LTS估计 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}} = \widetilde{\boldsymbol{\beta}}$.

2. 计算方法

取 $k = [n/2]^* + [(p+1)/2]^*$，现在计算式(4-9)的解 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$. 根据定理1，当 n 和 p 不太大时，可以精确地计算 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$. 这里总假定 $(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \cdots, (\boldsymbol{x}_n, y_n)$ 具有一般位置. 显然这 n 个点两两不同，则在这 n 个点中有 $\binom{n}{p} \xlongequal{\text{def}} M$ 个 p 点集. 由每

个 p 点集可算出一个 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$,使这 p 个点满足 $y = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{\beta}}$. M 个 p 点集可算出 M 个 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$,记作 $\hat{\boldsymbol{\beta}}(1),\hat{\boldsymbol{\beta}}(2),\cdots,\hat{\boldsymbol{\beta}}(M)$. 于是必存在 j^*,使

$$\sum_{i=1}^{k}[r^2(\hat{\boldsymbol{\beta}}(j^*))]_{(i)} = \min_j \sum_{i=1}^{k}[r^2(\hat{\boldsymbol{\beta}}(j))]_{(i)}, \tag{4-10}$$

则 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}} = \hat{\boldsymbol{\beta}}(j^*)$ 即为所求.

当 n 和 p 比较大时,M 很大.卢瑟吾等人(1987)在文献[3]中建议从 M 个 p 点集中随机抽取 m 个,计算相应的 $\hat{\boldsymbol{\beta}}(1),\hat{\boldsymbol{\beta}}(2),\cdots,\hat{\boldsymbol{\beta}}(m)$.找出 $\hat{\boldsymbol{\beta}}(j^*)$ 满足式(4-10),并取 $\hat{\boldsymbol{\beta}}(j^*)$ 为 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$ 的近似解. 确定 m 的原则是使从这 m 个 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 中找出的 $\hat{\boldsymbol{\beta}}(j^*)$ 以很大的概率等于精确解. 他们还根据不同的精确度分别提出了两组相应于不同 p 和 n 的 m 值. 由于计算 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}}$ 的主要目的是作为迭代计算的初始值,故仅将对应于较低精度(从而 m 较小,计算较快)的一组 m 值列于下表4-1中,更详细的情况可参阅文献[3].

表 4-1

p	n	m
1	$n \leqslant 150$	$\binom{n}{p} = n$
2	$n \leqslant 25$	$\binom{n}{p}$
	$n > 25$	300
3	$n \leqslant 15$	$\binom{n}{p}$
	$n > 15$	400
4	$n \leqslant 12$	$\binom{n}{p}$
	$n > 12$	500
5	$n \leqslant 11$	$\binom{n}{p}$
	$n > 11$	600
6		700
7		850
8		1250
$p \geqslant 9$		1500

4.3.3 有界影响、高崩溃点、高效率估计

这里介绍的有界影响、高崩溃点和高效率回归估计是由科克利(Coakley)和赫特曼斯帕格(Hettmansperger)(1993)提出的,故简称之为**CH估计**,记作$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}$.在这之前的稳健回归估计方法都没有能同时达到这三种性质.

1.估计方法

CH估计是用一个高崩溃点的估计$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_0$作初始估计,用相应的残差构造误差刻度的辅助估计$\widehat{\sigma}_0$,再用一个有界影响估计进行一步迭代得到的.他们取

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_0=\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{LTS}},$$

其中$k=\left[\frac{n}{2}\right]^*+\left[\frac{(p+1)}{2}\right]^*$.$\widehat{\sigma}_0$可取为

$$\widehat{\sigma}_0=\operatorname*{med}_i\frac{\{|r_i(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_0)-\operatorname*{med}_j\{r_j(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_0)\}|\}}{0.6745}.$$

他们用的有界影响估计相应的η函数形为

$$\eta(\boldsymbol{x},r)=W(\boldsymbol{x})\psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{r}{W(\boldsymbol{x})}\right),$$

其中ψ_{H}是尤伯的ψ函数(见表2-1),$W(\boldsymbol{x})$是加在解释变量上的权函数.设$\widehat{m}$和$\widehat{c}$分别是解释变量的位置和散布距阵基于$\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n$的MVE估计(见第3章),$\chi_f^2(\gamma)$是自由度为$f$的卡方分布的$\gamma$分位点,则权$W(\boldsymbol{x})$可取为

$$W(\boldsymbol{x})=\min\left\{1,\left[\frac{\chi_{p-1}^2(\gamma)}{(\boldsymbol{x}-\widehat{m})^{\mathrm{T}}\widehat{c}^{-1}(\boldsymbol{x}-\widehat{m})}\right]^{\alpha}\right\}.$$

令

$$\boldsymbol{B}_{\mathrm{CH}}=\operatorname{diag}\left[\psi'_{\mathrm{H}}\left(\frac{r_1(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_0)}{\widehat{\sigma}_0W(\boldsymbol{x}_1)}\right),\cdots,\psi'_{\mathrm{H}}\left(\frac{r_n(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_0)}{\widehat{\sigma}_0W(\boldsymbol{x}_n)}\right)\right],$$

则有

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}_0+[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_{\mathrm{CH}}\boldsymbol{X}]^{-1}\sum_{i=1}^n\widehat{\sigma}_0W(\boldsymbol{x}_i)\psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{r_i(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_0)}{\widehat{\sigma}_0W(\boldsymbol{x}_i)}\right)\boldsymbol{x}_i,$$

其中

$$\boldsymbol{X}=[\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n]^{\mathrm{T}}.$$

这里还有几个常数需要说明:①ψ_{H}中的常数k可取为1.5和2之间的数;②γ一般取为0.9或0.95;③α是不小于1的正数.

2.主要性质

在不太强的条件下,可得到$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}$有以下性质:

1° 具有刻度、符号、仿射和回归同变性.

2° 设$n\geqslant 2p-2$,以$\varepsilon^*(T)$表示T的渐近崩溃点,则

$$\varepsilon^*(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}) = \min\{\varepsilon^*(\hat{\boldsymbol{\beta}}_0), \varepsilon^*(\hat{\sigma}), \varepsilon^*(W(\cdot))\}.$$

以上选择的 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_0$, $\hat{\sigma}_0$ 和 $W(x)$，其渐近崩溃点都是 $\frac{1}{2}$，因此

$$\varepsilon^*(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}) = \frac{1}{2}.$$

3° 在上述所定义的诸记号下，当 $n \to \infty$ 时，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{B}}_{\mathrm{CH}}\boldsymbol{X}/n$ 依概率收敛到一个正定矩阵，记作 $\boldsymbol{D}$，而且 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^2\boldsymbol{X}/n$ 依概率收敛到另一个正定矩阵，记作 $\boldsymbol{H}$，其中

$$\boldsymbol{V} = \mathrm{diag}\left(W(\boldsymbol{x}_1)\psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{r_1(\hat{\boldsymbol{\beta}}_0)}{\hat{\sigma}_0 W(\boldsymbol{x}_1)}\right), \cdots, W(\boldsymbol{x}_n)\psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{r_n(\hat{\boldsymbol{\beta}}_0)}{\hat{\sigma}_0 W(\boldsymbol{x}_n)}\right)\right).$$

4° $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}$ 有渐近正态性

$$\sqrt{n}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}} - \boldsymbol{\beta}) \xrightarrow{\mathrm{d}} N(0, \sigma^2\boldsymbol{\Sigma})$$

和渐近表达式

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta} = \sigma[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{B}}_{\mathrm{CH}}\boldsymbol{X}]^{-1}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} W(\boldsymbol{x}_i)\psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}}{\sigma W(\boldsymbol{x}_i)}\right)\boldsymbol{x}_i\right) + o_p(n^{-1/2}),$$

其中

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{H}\boldsymbol{D}^{-1}.$$

5° $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}$ 的影响函数有界，且

$$\mathrm{IF}((\boldsymbol{x}, y), \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}) = \sigma\boldsymbol{D}^{-1}W(x)\psi_{\mathrm{H}}\left(\frac{y - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}}{\sigma W(\boldsymbol{x})}\right)\boldsymbol{x}.$$

6° 在 ψ_{H} 中取 $k \geqslant 1.345$，则在误差为正态分布 $N(0, \sigma^2)$ 时，$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}$ 相对于 LS 估计的渐近效率不小于 0.95.

3. 应用于回归诊断

由于 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}$ 具有很好的稳健性和估计精度（效率高），因此基于 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}$ 作回归诊断比较可靠. 具体做法是：

(1) 求出基于 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}$ 的误差刻度估计 $\hat{\sigma}$ 和各类的标准化残差 r_i^*，其计算公式为

$$\hat{\sigma} = \operatorname*{med}_i\left\{\frac{|r_i(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}}) - \operatorname*{med}_j\{r_j(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}})\}|}{0.6745}\right\},$$

$$r_i^* = \frac{r_i(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}})}{\hat{\sigma}} = \frac{(y_i - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{CH}})}{\hat{\sigma}} \qquad (i = 1, 2, \cdots, n).$$

(2) 计算各点的稳健杠杆值：

$$h_i^* = (\boldsymbol{x}_i - \hat{m})^{\mathrm{T}}\hat{c}^{-1}(\boldsymbol{x}_i - \hat{m}) \qquad (i = 1, 2, \cdots, n).$$

(3) 对于那些 r_i^* 和 h_i^* 都大的点，才可怀疑为离群点；如 h_i^* 大，但 r_i^* 小（例如 $|r_i^*| < 2$）则不能认为是离群点. 另外，即使从统计原理上认为某点是离群点，也应从实际问题中找出原因.

5 检验及其他

5.1 简单假设的极小极大检验

考虑简单假设的检验问题. 设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ iid $\sim F$, 零假设 $H_0: F = F_0$, 对立假设 $K: F = F_1$, 且 F_i 有密度 $f_i(i = 0,1)$.

按照奈曼 - 皮尔逊(Neyman-Pearson)引理所给出的检验统计量 $\prod_{i=1}^{n}(f_1(X_i)/f_0(X_i))$ 是不稳健的, 因为只要有一个离群值 X_i, 使 $f_0(X_i)$ 或 $f_1(X_i)$ 很接近于零, 就会严重影响整个检验结果.

文献[2]用极小化极大原则构造了一个**稳健检验**. 设 $\mathscr{P}_i$ 是 $F_i(i = 0,1)$ 的邻域

$$\mathscr{P}_0 = \{F: F(x) \geqslant (1 - \varepsilon_0)F_0(x) - \delta_0, \forall x\},$$

$$\mathscr{P}_1 = \{F: 1 - F(x) \geqslant (1 - \varepsilon_1)(1 - F_1(x)) - \delta_1, \forall x\} \quad (0 < \varepsilon_i, \delta_i < 1, i = 0,1),$$

且 $\mathscr{P}_0$ 与 $\mathscr{P}_1$ 不相交. 尤伯找到了与 $\mathscr{P}_0, \mathscr{P}_1$ 有关的两个常数 $0 < a < b$, 用来对 $f_1(x)/f_0(x)$ 作截断, 即定义

$$A(x) = \begin{cases} a & (f_1(x)/f_0(x) < a), \\ \dfrac{f_1(x)}{f_0(x)} & (a \leqslant f_1(x)/f_0(x) \leqslant b), \\ b & (f_1(x)/f_0(x) > b), \end{cases} \tag{5-1}$$

并证明了对于给定的检验水平 α, 检验函数

$$\psi^*(X_1, X_2, \cdots, X_n) = \begin{cases} 1 & (\prod_i A(X_i) > c), \\ \gamma & (\prod_i A(X_i) = c), \\ 0 & (\prod_i A(X_i) < c). \end{cases} \tag{5-2}$$

(c 和 γ 是依赖于 $\mathscr{P}_0, \mathscr{P}_1$ 和 α 的常数)是一个极小化极大解, 即 $\sup\limits_{F \in \mathscr{P}_0} E_F\psi^* = \alpha$, 而且在检验类 $\Psi = \{\psi: \sup\limits_{F \in \mathscr{P}_0} E_F\psi \leqslant \alpha\}$ 中, ψ^* 在 $\mathscr{P}_1$ 上的最小功率达到最大, 即 $\inf\limits_{F \in \mathscr{P}_1} E_F\psi^* = \sup\limits_{\psi \in \Psi} \inf\limits_{F \in \mathscr{P}_1} E_F\psi$. 尤伯还指出, 这一结果不仅对于污染邻域是对的, 而且对于其他一些由常用的分布函数距离定义的邻域也是对的.

若 $F_0(x) = \Phi(x + \mu), F_1(x) = \Phi(x - \mu), \varepsilon_0 = \varepsilon_1 = \varepsilon, \delta_0 = \delta_1 = \delta$, 则有

$$a = b^{-1} = \exp(-2\mu k),$$

其中 k 由等式

$$\exp(-2\mu k)\Phi(\mu - k) - \Phi(-\mu - k) = (1 - \varepsilon)^{-1}(\varepsilon + \delta + \delta\exp(-2\mu k))$$

决定, 这里 Φ 为标准正态分布. 这时 $\ln A(x)$ 恰好是尤伯位置 M 估计的 ψ 函数, 即

$$\ln A(x) = \psi_{11}(x).$$

5.2 基于影响函数的单参数检验

卢瑟吾(Rousseeuw)和罗克蒂(Ronchetti)把影响函数推广到参数模型的假设检验中,利用汉甫的有界影响思想分别就单样本和双样本两种情况构造了稳健检验.这里以单样本情况为例,介绍他们的基本方法.

设 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\text{i.i.d}}{\sim} F(x, \theta), \theta \in \Theta, \Theta$ 为 $\mathbf{R}$ 中开凸集,欲检验 $H_0: \theta = \theta_0$,对立假设是单边的或双边的.又设 $T_n = T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 是该参数检验问题的一个检验统计量.对于给定的检验水平 α,由 T_n 在 H_0 成立时的分布或渐近分布,可确定一个集合 w_α,当 $T_n \in w_\alpha$ 时,拒绝零假设.假定存在分布函数的泛函 T,使得当 $X_1, X_2, \cdots, X_n \overset{\text{i.i.d}}{\sim} G(x)$ 时,$T_n(X_1, X_2, \cdots, X_n)$ 依概率收敛到 $T(G)$.这些条件在一般假设检验中都是满足的,但这个泛函 T 常常不具有费希尔(R.A.Fisher)相合性,即 $T[F(\cdot, \theta)] \neq \theta$,所以需要作适当的变化.

令 $\xi_n(\theta) = E_\theta(T_n), \xi(\theta) = T[F(\cdot, \theta)]$,并假定:

1° $\xi(\theta)$ 是严格单调的连续可导函数;

2° $\xi_n(\theta) \to \xi(\theta) \quad (n \to \infty)$.

由条件 1° 可知,$\xi(\theta)$ 有反函数 ξ^{-1}.令 $u(G) = \xi^{-1}(T(G))$.并定义上述由 T_n 构造的检验的影响函数为

$$\mathrm{IF}_{检}(x, T, F) = \mathrm{IF}(x, u, F),$$

检验的过失误差敏感度为

$$\gamma^*_{检}(T, F) = \sup_x |\mathrm{IF}_{检}(x, T, F)| = \gamma^*(u, F).$$

卢瑟吾和罗克蒂证明,在上述条件下,该检验的渐近效能(efficacy)为

$$e(T, F) = \left(\int \mathrm{IF}_{检}(x, T, F)^2 \mathrm{d}F(x)\right)^{-1}.$$

由于在一定条件下,检验的渐近功效 β 与效能 $e = e(T, F)$ 之间有关系

$$\beta = 1 - \Phi(\Phi^{-1}(1 - \alpha) - \delta\sqrt{e}),$$

其中 $\delta > 0$ 是常数,因此,当 H_0 成立时,在检验的过失误差敏感度 $\gamma^*_{检}(T, F(\cdot, \theta_0)) \leqslant c$ 的条件下,极大化渐近功效 $\beta = \beta(T)$,就等价于在 $\gamma^*_{检}(u, F(\cdot, \theta_0)) \leqslant c$ 的条件下,极小化 $\int \mathrm{IF}(x, u, F(\cdot, \theta_0))^2 \mathrm{d}x$.这正是汉甫关于估计问题的优良性准则(参见 1.3.2 小节).于是可以利用汉甫的结果,求出上述条件优化问题的解 u,进而得到统计泛函 T 和相应的检验统计量 $T_n = T(F_n)$.如前所述,F_n 是经验分布.

然而,与估计问题类似,对于常见的单样本和双样本位置或刻度检验而言,上述有界影响方法给出的检验统计量与 5.1 节中极小化极大方法给出的检验统计量类似,均具有式(5-1) 的形式.因此,可以直接从似然比出发,用式(5-1) 和式(5-2) 来构造稳健检验.这里的难点在于如何从检验类 Ψ 中找出极小化极大解 ψ^*.

5.3　关于稳健检验的补充说明

文献中关于稳健检验的讨论,特别是理论性的讨论,比稳健估计和回归的讨论少得多.例如,在估计和回归中有很多关于崩溃点问题和高崩溃点方法的讨论.而在检验问题中,可以说关于崩溃点概念至今尚没有能被普遍接受的定义,尽管文献中已经出现过三四种定义,而且,更主要的是,这些定义基本上都是用来计算和比较已有方法的崩溃点性质,并没有产生新的好检验方法.这方面的情况可参见文献[6]及所引文献.

另一方面,原有许多检验,包括 t 检验和 F 检验等都有不同程度的稳健性,特别是基于秩统计量的检验,例如符号检验、秩和检验等都有很好的稳健性,这在许多非参数方法的书中都有讨论.也许正因为如此,检验的稳健性问题不像估计、回归等问题那么严重,因而讨论较少吧.

5.4　关于稳健方法的若干补充

5.4.1　数据分析与稳健方法

在进行数据分析时,一般都是先用一个模型来描述数据(这里称之为假定模型);再根据数据对模型中的未知部分进行推断(估计、检验等).因此,假定模型与数据是否相符对统计推断而言是非常重要的.然而,如1.1节所述,任何模型都最多只能是对数据的近似描述.稳健统计方法所适用的是数据中多数观测值与假定模型相符,少数观测值可能与假定模型有较大的差距的情况.所谓稳健统计方法,也就是使得那些与假定模型不符的少数观测值不起多大作用,而主要基于对假定模型相符的多数观测值进行推断的方法.这就是应用稳健统计方法的前提背景.也就是说,如果所用的假定模型与大多数观测值不符(例如用直线模型描述有曲线关系的数据),则即使所用的方法是稳健的,也难以作出正确的推断.这时,应该首先修改模型.例如,在回归问题中对解释变量或响应变量作适当的变换等.

5.4.2　非稳健方法的稳健化

尽管自20世纪60年代以来稳健统计有很大发展,但相对实际需要而言,仍远远不够.对于许多问题来说,当没有现成的稳健方法时,可以考虑将原来的非稳健方法稳健化.例如:

(1) 将LS估计改成M估计　在一些非线性回归、非参数回归,甚至自回归等时间序列的建模中,LS估计应用非常广泛,但它没有稳健性.这时,用 L_1 估计,或尤伯和图戈伊的 ρ 函数代替LS估计中的 $\rho(t) = t^2$(参见表2-1),即可使稳健性得到改善.

(2) 用稳健的统计量代替不稳健的统计量　有许多统计方法(例如 t 检验、F 检验、判别分析、聚类分析等)是建立在样本的均值/标准差或样本的均值/协方

差阵的基础上的，这时用稳健的位置／刻度估计和位置／散布矩阵估计代替它们，就可以得到比较稳健的方法．此外，如 5.3 节所述，秩方法是用观测值的秩代替观测值本身的方法，它也具有较好的稳健性．

参 考 文 献

1 Hampel F R et al. Robust statistics, the approach based on influence functions. New York: John Wiley and Sons, 1986.

2 Huber P J. Robust statistics. New York: John Wiley and Sons, 1981.

3 Rousseeuw P J, Leroy A M. Robust regression and outlier detection. New York: John Wiley and Sons, 1987.

4 Li G Y, Chen Z L. Projection-pursuit approach to robust dispersion matrices and principal components: primary theory and Monte-Carlo. JASA, 1985(80): 756 ~ 766.

5 李国英．稳健统计的发展概况．数理统计与应用概率，1987(2): 369 ~ 384; 1987(3): 493 ~ 510.

6 张健，李国英．稳健估计和检验的若干进展．数学进展，1998(5): 403 ~ 414.

·随机数学卷·

第 10 篇

蒙特卡罗法

编　者　孙嘉阳　石　坚
　　　　丛树铮　徐映波
审校者　郑忠国

目　录

引　言

蒙特卡罗(Monte Carlo)是摩纳哥的一个著名城市,以赌博闻名于世,蒙特卡罗法借用该城市的名称来象征性地表明该方法的特点.蒙特卡罗法是威勒蒙(Velleman)和冯·诺伊曼(Von Neumann)在20世纪40年代中为研制核武器而首次提出来的.在此之前,作为该方法的基本思想,实际上早已被统计学家所发现和利用.例如,早在17世纪的时候,人们就知道按频数来决定概率.又如,19世纪末,很多人曾利用随机投针试验来验证大数定律,并根据针与地面上平行线束(距离均为2倍针长)相交的概率 P 等于 π 的倒数,用频数 n/N 替代概率 P,进而得到 $\pi\approx\hat{\pi}=N/n$.

过去的二十多年,计算机科学的飞速发展已大大减轻了统计学中繁琐和费时的计算,同时也促进发展了一些新的统计方法,并构建了一个"新的"统计领域——统计计算.现代统计计算包括数值计算、半数值计算、图计算以及符号计算.**蒙特卡罗法**属半数值计算,或称为随机模拟.有关其他类型的计算和新的统计方法可在数值计算和现代统计计算的相关内容里找到.

随机模拟由各种运用伪随机数来解决问题的技术组成.随机模拟的基本方法是"蒙特卡罗方法",蒙特卡罗法有时是模拟的同义词.

随机模拟包括蒙特卡罗法及其各种推广或变形.它们的简单性、必要性和有效性使得随机模拟在科学探索中很流行.虽然解析解或数值解(若它们存在)优先于模拟解(因为前者是精确的或可以做到尽可能地精确的),但是,确实有太多太多重要的科学问题难于或不可能进行解析处理或数值处理,而只能进行模拟处理.此外,模拟试验既可以为知识探求提供提示和方向,又是检验假设、理论和模型是否成立的一条途径(有时是唯一途径).随机模拟还是一些重要统计方法的基础,比如,它是置换检验、自助法(bootstrap)、MCMC等的基础.蒙特卡罗法已成为现代科学计算的重要方法之一.

1　概　述

1.1　随机模拟的一般原理

蒙特卡罗法所能解决的问题,按性质的不同可分为随机性问题与确定性问题,以及随机性和确定性混合的问题等三类.下面先举例说明.

1.随机性问题

假设一个射击运动员的射击成绩为 G,令 x 表示弹着点到靶心的距离,$g(x)$

表示得分，$f(x)$ 表示该运动员射击的弹着点分布的密度函数，则其射击成绩 G 是 $g(X)$ 的期望，即

$$G = \int g(x)f(x)\mathrm{d}x = E(g(X)),$$

其中 $X \sim f(x)$. 如果该运动员进行了实弹射击，射击的弹着点依次为 $x_1, x_2, \cdots, x_N$，则这次射击平均得分为

$$G_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g(x_i).$$

显然，G_N 是 G 的一个估计. 蒙特卡罗法计算射击成绩 G（实际上是计算积分）是用 G_N 作为 G 的估计，不同的是，蒙特卡罗法不真进行实弹射击，而只在计算机上模拟实弹射击，亦即由分布 $f(x)$ 中抽样产生 $x_1, x_2, \cdots, x_N$ 来计算射击成绩.

上例是一个与随机变量有关的随机性问题. 蒙特卡罗法对这类问题的应用比较简单直观，它是统计模拟最经常最成功的应用领域之一.

2. 确定性问题

考虑积分

$$\theta = \int_0^1 f(x)\mathrm{d}x.$$

显然，上述积分就是 $E(f(U))$，即

$$\theta = \int_0^1 f(x)\mathrm{d}x = E(f(U)),$$

其中 U 是$(0,1)$上的均匀随机变量，服从均匀分布 $\mathscr{U}(0,1)$. 因此，如果 $u_1, u_2, \cdots, u_N$ 是来自 $\mathscr{U}(0,1)$ 的一个独立同分布的随机样本的观测值，θ 的一个简单估计就是

$$\hat{\theta} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(u_i), \tag{1-1}$$

若 $u_1, u_2, \cdots, u_N$ 是由某个随机数发生器在计算机上产生的伪随机数，则称 $\hat{\theta}$ **是蒙特卡罗估计**.

3. 随机性和确定性的混合问题

布丰(Buffon)投针试验 在19世纪末，布丰投针试验常用来确定 π 的值以及检验大数律. 假设一个长度为 L 的针被随机地掷于画有间距为 D 的平行线的桌子上，其中 $D > L$，则该针与其中一条线相交的概率

$$P = \frac{2L}{\pi D} = \frac{1}{\pi} \qquad (\text{若 } 2L = D), \tag{1-2}$$

因此，若一根长度为 $D/2$ 的针确实随机地被掷于桌上 N 次，令 $\hat{P}_N = n/N$，其中 n 是针与线相交的次数，则由弱大数律知，依概率有

$$\hat{P}_N \to P \quad (N \to \infty).$$

布丰通过考察 $\hat{P}_N$ 的值是如何在 P 附近分布的，来验证弱大数律，并对某些大的 N，用 $\hat{\pi}_N$ 的值作为 π 值的一个粗略的近似.

在投针试验时，从针的中心到与之最近的平行线画一条连线，令 X 为其长度，Θ 为针与平行线所夹的最小角，如图 1-1 所示．这里，可以合理地把"随机地"理解为 X 与 Θ 是相互独立的随机变量，X 服从区间 $(0,D/2)$ 上的均匀分布，Θ 服从 $(0,\pi/2)$ 上的均匀分布，因此 X 和 Θ 的联合密度

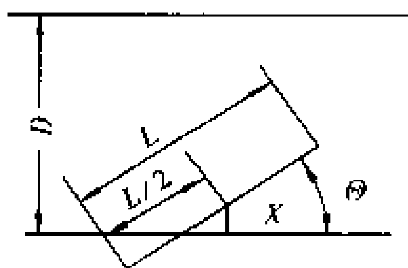


图 1-1

$$f(x,\theta)=f_X(x)f_\Theta(\theta)=\frac{4}{\pi D}\qquad\left(0<x<\frac{D}{2},0<\theta<\frac{\pi}{2}\right).$$

当且仅当 $X<(L/2)\sin\Theta$ 时，针与线相交；且此事件发生的概率

$$P=P\left(X<\frac{L}{2}\sin\Theta\right)=\frac{4}{\pi D}\int_0^{\pi/2}\int_0^{(L/2)\sin\theta}\mathrm{d}x\,\mathrm{d}\theta=\frac{2L}{\pi D}.$$

因此，一个相应的蒙特卡罗试验如下：独立地从 $\mathscr{U}(0,D/2)$ 中产生独立同分布的 $X_1,X_2,\cdots,X_N$ 和从 $\mathscr{U}(0,\pi/2)$ 中产生独立同分布的 $\Theta_1,\Theta_2,\cdots,\Theta_N$，计数

$$n=\#\left\{i:X_i<\frac{L}{2}\sin\Theta_i,i=1,2,\cdots,N\right\},$$

并用 n/N 估计 p 和用 N/n 估计 π.

4. 约翰斯通 - 维莱曼的蒙特卡罗试验

约翰斯通 - 维莱曼(Johnstone-Velleman)蒙特卡罗试验的目的之一是把回归斜率的两个"抗扰"估计与最小二乘估计作比较．解析上的比较是困难的，但这里实际感兴趣的是估计量的有限样本性质．在简单线性回归模型中，数据是 (x_i,y_i)，$i=1,2,\cdots,n$，且(设想)响应变量 y 与预报变量 x 之间是线性关系，即

$$y_i=\alpha+\beta x_i+\varepsilon_i \tag{1-3}$$

其中 ε_i 是均值为零的不可观测误差变量，β 的最小二乘估计 $\widehat{\beta}_{\mathrm{LS}}$ 满足

$$\sum_{i=1}^n(y_i-\widehat{\alpha}_{\mathrm{LS}}-\widehat{\beta}_{\mathrm{LS}}x_i)^2=\min_{\alpha,\beta}\sum_{i=1}^n(y_i-\alpha-\beta x_i)^2.$$

两个"抗扰"估计是最小绝对值估计(L1)和"抗扰"线估计(RL)．最小绝对值估计满足

$$\sum_{i=1}^n|y_i-\widehat{\alpha}_{\mathrm{L1}}-\widehat{\beta}_{\mathrm{L1}}x_i|=\min_{\alpha,\beta}\sum_{i=1}^n|y_i-\alpha-\beta x_i|;$$

而 β 的"抗扰"线估计 $\widehat{\beta}_{\mathrm{RL}}$ 由如下方法得到：对 x_i 的值由小到大排序，并将其分成三组 $L<M<R$，然后选取 $\widehat{\alpha}_{\mathrm{RL}}$ 和 $\widehat{\beta}_{\mathrm{RL}}$ 使得

$$\underset{i\in L}{\text{med}}(y_i - \widehat{\alpha}_{RL} - \widehat{\beta}_{RL}x_i) = \underset{i\in R}{\text{med}}(y_i - \widehat{\alpha}_{RL} - \widehat{\beta}_{RL}x_i) = 0,$$

其中 med 表示中位数.比较这些估计的一个自然的准则是均方误差：

$$\text{MSE}(\widehat{\beta},\beta) = E(\widehat{\beta}-\beta)^2,$$

其中 β 是回归斜率真值.表 1-1 所示的是对各种情形进行的交叉比较.

表 1-1

样本量(n)	10,22,40
误差分布(ε_i)	标准正态：$N(0,1)$ 污染正态：0.9 $N(0,1)$ + 0.1 $N(0,9)$ Slash：$N(0,1)/\mathscr{U}(0,1)$
预报分布(X_i)	x_i = 等间距点列 $x_i \sim N(0,1)$

一个实际问题是，不论它是随机性的问题还是确定性的问题或二者兼而有之，大多数随机模拟的目标都是考虑估计一个概率或一个矩，如估计均方误差.换句话说，它们与一个期望或一个积分有关，例如，

$$P(X < c) = E(I_{\{X<c\}}) = \int_{-\infty}^{c} f(x)\,dx,$$

其中 f 是 X 的概率密度函数(简称 pdf)；I_A 是示性函数，当 $x \in A$ 时为 1，否则为 0；c 为任意常数.

$$\text{MSE}(\widehat{\theta},\theta) = E((\widehat{\theta}(X) - \theta)^2) = \int_{-\infty}^{+\infty}(\widehat{\theta}(x) - \theta)^2 f_\theta(x)\,dx,$$

其中 f_θ 是 X 的概率密度函数.

一般地，假设对估计被积函数为 g、积分区域为 $D \in \mathbf{R}^d$ 的积分

$$I = \int_D g(x)\,dx \tag{1-4}$$

感兴趣，蒙特卡罗法计算或估计 I 的基本步骤如下.

(1) 将 I 改写为期望的形式：

$$\int_D g(x)\,dx = \int_D \frac{g(x)}{f(x)} f(x)\,dx = E(h(X)),$$

其中 $h(x) = g(x)/f(x)$，X 的 pdf 为 $f(x)$，$f(x)$ 为适当选取的函数，在 $g(x)$ 的支撑上大于 0.对于式(1-1)所对应的例子，有 $f(x) = 1, h(x) = g(x), D = (0,1)$.

(2) 在计算机上产生一组(伪)随机数 $X_1, X_2, \cdots, X_N$，它们独立同分布，且来自与 $f(x)$ 对应的分布.

(3) 用

$$I_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} h(X_i) \tag{1-5}$$

估计 I. $\widehat{I}_N$ 称为 I 的(朴素)蒙特卡罗估计.

1.2 随机模拟的收敛性与误差

1. 随机模拟的收敛性

根据概率论中的强大数定理,随机模拟蒙特卡罗法的估计值 $\widehat{I}_N$ 依概率收敛于 I,即 $\widehat{I}_N$ 满足

$$P(\lim_{N\to\infty}\widehat{I}_N = I) = 1$$

的充分必要条件是随机变量 $h(X)$ 满足条件

$$E(|h|) = \int |h(x)| f(x)\mathrm{d}x < \infty.$$

2. 随机模拟的误差

下面讨论蒙特卡罗估计 $\widehat{I}_N$ 与真值 I 之间的统计误差问题. 由中心极限定理可知,只要随机变量 $h(X)$ 的方差 σ^2 有限且非零,则对于任意 $c \geqslant 0$,都有

$$\lim_{N\to\infty} P\left\{\frac{\sqrt{N}}{\sigma}|\widehat{I}_N - I| < c\right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-c}^{c}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\mathrm{d}x.$$

因此,当 N 足够大时,可以认为近似等式

$$P\left(|\widehat{I}_N - I| < \frac{c_\alpha\sigma}{\sqrt{N}}\right) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-c_\alpha}^{c_\alpha}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\mathrm{d}x = 1 - \alpha$$

成立,其中 α 为置信度;$1-\alpha$ 为置信水平. 于是,可以根据问题的要求确定置信水平,利用正态分布表来确定 c_α,从而得到蒙特卡罗估计 $\widehat{I}_N$ 与真值 I 之间的误差

$$|\widehat{I}_N - I| < \frac{c_\alpha\sigma}{\sqrt{N}}.$$

通常取 c_α 为 0.674 5,1.96 或 3,相应的置信水平依次为 0.5,0.95 或 0.997.

$N^{-1/2}$ 的收敛速度非常慢,为使收敛精度提高 1 倍,需要将 N 增加到 $4N$!注意到,1 维数值积分的误差率可以达到 N^{-2} 或 N^{-4} 的数量级. 因此,一个好的模拟计算工作者常常会想办法来压缩方差 σ^2. 这便导出将于第 7 章介绍的方差压缩技术.

1.3 随机模拟的基本特点

与一般计算方法相比,蒙特卡罗法有如下非常突出的特点.

(1) 简单.

(2) 收敛速度与问题的维数无关. 由蒙特卡罗法的误差公式中可以看出,在置信水平一定的情况下,蒙特卡罗法的误差除了与问题所确定的随机变量 $h(X)$ 的方差 σ^2 有关外,只取决于样本量 N,而与样本观测值中的 x_i 是多少维空间上的点无关,即蒙特卡罗法的收敛速度与问题的维数无关. 显然,这是其他计算方法所不常具有的. 因此,蒙特卡罗法常用于高维积分和其他复杂问题.

(3) 受问题的几何条件影响不大.例如,对于积分

$$G^D = \int_D \cdots \int_D g(x_1, x_2, \cdots, x_s) \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_s$$

(其中 D 为 s 维单位正方体内的区域)的计算问题,不管区域 D 如何特殊,都可以给出如下的类似的近似估计:

$$\hat{G}_N^D = \frac{1}{N} \sum_{(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \cdots, x_s^{(i)}) \in D} g(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \cdots, x_s^{(i)}),$$

其中 $(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \cdots, x_s^{(i)})(i = 1,2,\cdots,N)$ 为均匀分布在 s 维单位正方体内的点的 N 次独立抽样值.显然,这也是其他计算方法所不常具有的.

(4) 具有处理连续问题的能力.蒙特卡罗法不像其他计算方法那样,对连续问题一定要进行离散化.其他计算方法需要事先确定网格点,一旦网格点确定后,问题所关心的就是这些网格点上的值,而与其他点上的值无关.例如,在核临界安全问题中常需要计算如下奇次积分方程特征值:

$$\lambda\phi(x) = \int_D \phi(x') K(x' - x) \mathrm{d}x',$$

其中 x' 和 x 为三维空间上的点.对此问题,一般计算方法总是需要在积分区域 D 上划分网格点(这一步用计算机实现比较困难,而且需要占用计算机的大量内存单元),蒙特卡罗法则不需要这样做.显然,蒙特卡罗法的这一优点,不仅使它的精确度进一步增加,节省计算机大量内存单元,而且给建立蒙特卡罗法通用程序带来了很大方便.

(5) 具有直接处理随机性问题的能力.蒙特卡罗法对于那些本身具有统计性质的所谓随机性问题,不需要像常规方法那样首先将它转化成确定性问题,如转化成某方程的解,然后再通过解决确定性问题得到问题的答案.例如,粒子进入屏蔽层与介质发生多次碰撞后可能被吸收,也可能反射回来或穿过屏蔽层,问题所关心的常是穿透概率.对于这样一个随机性问题,常规方法是首先给出它所满足的方程——一个积分微分方程(即转化为确定性问题),然后用某种计算方法解这一确定性问题,进而得到问题的解答.蒙特卡罗法可以直接从随机性问题出发,通过模拟原问题的实际过程得到问题的解答.

蒙特卡罗法也存在一些缺点,主要有:对于维数少的问题,一般是一维和二维的问题,由于它的收敛速度慢,所以不如其他计算方法好;对于大的几何系统问题和小概率计算问题,它的计算结果有时比实际结果偏低;误差是概率误差而不是一般意义下的误差.因此,蒙特卡罗法应当与一个适当设计的统计试验结合使用,使得蒙特卡罗估计的可能误差变小.例如,可在运行式(1-5)中的简单步骤之前,通过重要度抽样或以后要介绍的其他方差压缩方法,将一个小概率问题转换为另一种问题.

一个模拟试验常常包含许多部分,而且还可能包含有几种简单或更一般的蒙特卡罗估计以及其他分析方法.一个典型的模拟试验包括如下步骤.

(1) 产生一些伪随机数,即正态、均匀和污染正态随机数等.

(2) 根据模型构造,拟出模拟的数据,即选取 $(\alpha_0, \beta_0) = (0,1)$,对于 $j = 1,2,$

$\cdots, N$，有

产生　　$(\varepsilon_i, x_i), i = 1,2,\cdots,n$，

计算　　$y_i = \alpha_0 + \beta_0 x_i + \varepsilon_i, \quad i = 1,2,\cdots,n$.

且基于数据　　$(x_i, y_i), i = 1,2,\cdots,n$，

计算　　$(\widehat{\alpha}_{LS}, \widehat{\beta}_{LS}), (\widehat{\alpha}_{LL}, \widehat{\beta}_{LL}), (\widehat{\alpha}_{RL}, \widehat{\beta}_{RL})$，

即调用某些子程序或函数it.　　(1-6)

(3) 分析数据，即通过

$$\widehat{\text{MSE}}\ (\widehat{\beta}, \beta_0) = \frac{1}{N-1}\sum_{j=1}^{N}(\widehat{\beta}^{(j)} - \beta_0)^2$$

来计算 $\widehat{\text{MSE}}\ (\widehat{\beta}, \beta_0)$ 的估计，其中角标 j 表示式(1-6)中斜率的第 j 次模拟估计值，并比较 $\widehat{\text{MSE}}\ (\widehat{\beta}_{LS}, \beta_0)$，$\widehat{\text{MSE}}\ (\widehat{\beta}_{LL}, \beta_0)$，$\widehat{\text{MSE}}\ (\widehat{\beta}_{RL}, \beta_0)$.

这样，随机模拟中的主要问题是：

(1) 如何获得一个好的(均匀)随机数发生器(RNG)?

(2) 如何获得一个好的非均匀 RNG?

(3) 模拟次数 N 应该取多少?

(4) 有哪些压缩蒙特卡罗估计方差的方法?

(5) 什么是好的应用问题?

这些都是在后面各章中要讨论的问题.

2　伪随机数的产生

均匀随机数的产生几乎是所有模拟方法和算法的基础.这由如下的理论作依据：只要有了某种具有连续分布的随机数，就可以通过某种方法产生其他任意分布的随机数.由于(0,1)区间上的均匀分布是最简单、最基本的连续分布，所以通常都以(0,1)上均匀分布的随机数为基础，用它来产生其他分布的随机数.对一个模拟人员来说，了解其随机数发生器的好坏是重要的，因为一个模拟试验最终导出的错误信息或许是由产生的均匀随机数造成的.

下面恒以 U 表示(0,1)上均匀分布的随机变量.为避免混淆，把均匀分布随机数简称为随机数，用 u 或 u_i 来表示，并将数列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 表示为 $\{x_i\}_{i=1}^n$，而 $\{x_i\} = \{x_i\}_{i=1}^{\infty}$ 则表示无穷数列.

产生随机数的目标是获得一列 $u_1, u_2, \cdots, u_m$，使其看起来像是来自于 $\mathscr{U}(0,1)$ 的独立同分布的随机变量观测值.

2.1　产生随机数的一般方法

在计算机上产生随机数的方法，大致可分为三类.

1. 利用随机数表

从0,1,…,9这十个数字中,以相同概率独立地抽取一个,称为随机数字. 由一系列的随机数字组成的表称为随机数表. 由随机数表便可以构成任意位数的随机数. 例如要得到三位数字的随机数,而某随机数表的随机数字依次为86515 90795 66155…,则利用这随机数表可以得到相应的三位数字的随机数,依次为0.865,0.159,0.079,0.566,0.155,…. 这种随机数表很多,其中比较有名的是兰德公司的百万数字的随机数表.

在计算机上使用随机数表的方法是将随机数表输入机器中. 这类方法的主要缺点是,随机数的容量往往很有限,不能满足需要.

2. 利用物理随机数发生器

在计算机上安装一台物理随机数发生器后就可以直接在计算机上产生随机数. 由于计算机多采用二进制,故以某种物理现象的发生与否(也可以是否达到某种物理量的界限)分别记为0和1,用这种办法产生的0和1填满计算机中某一单元数字部分的所有二进制位(阶码部分为零),当发生与不发生的概率 p 与 q 相同时,就可得到(0,1)上均匀分布的随机数. 这种物理的随机源可取质点放射源、电子管或晶体管的固有噪声等,只需采取措施保证 $p = q = 1/2$ 即可.

使用物理随机数发生器在计算机上得到需要的随机数,可节省产生随机数的时间,提高机器的使用效率. 但随机数发生器需要检验和维修以保持其稳定性. 另外,这种随机数不能重复发生,从而不能对模拟问题进行复算检查. 最重要的是,这种随机数列有数量是否充分的问题,以及有偏差和相关性的问题,这是一个好的独立同分布的 $\mathscr{U}(0,1)$ 随机变量所不应该有的. 这些缺陷,大大降低了这类方法在计算机上使用的价值.

3. 利用数学方法

这是目前使用最广、发展最快的一类方法. 当然,在一台确定性的计算机上由某些数学公式得到的一列随机数 $u_1, u_2, \cdots, u_m$ 不是随机的!但是,如果对公式或随机数发生器一无所知的话,则期望这些数与一个独立同分布的 $\mathscr{U}(0,1)$ 随机变量观测值无法辨别是可能的. 因此,这里所讨论的随机数被称为伪随机数或伪随机差.

2.2 线性同余法

产生随机数的数学方法很多,如平方取中法、乘积取中法、指令移位法和加同余法等等,但目前应用最多的是线性同余法,特别是乘同余法.

用**线性同余法**(linear congruential)(又称混合同余法(mixed congruential))产生随机数,使用如下的递推公式:

$$x_{n+1} \equiv \lambda x_n + c \pmod{M} \qquad (n = 0,1,2,\cdots), \tag{2-1}$$

其中 x_0 为初值;λ 为乘子;c 为增量;M 为模,这些都是非负整数,而且 λ, c 及 x_n($n = 0,1,2,\cdots$)都小于 M. 上式的 x_{n+1} 是 $\lambda x_n + c$ 被 M 整除后的余数,称为 x_{n+1} 与 $\lambda x_n + c$ 对模 M 同余. 由于 $x_n < M$,从而

$$u_n = \frac{x_n}{M} \tag{2-2}$$

就是区间[0,1]上的数列.例如,当 $x_0 = \lambda = c = 7, M = 10$ 时,可以得到如下数列

$$\{x_n\} = 7,6,9,0,7,6,9,0,\cdots$$

$$\{u_n\} = 0.7,0.6,0.9,0,0.7,0.6,0.9,0,\cdots$$

这是一个周期为4的周期数列.

实际上,任一迭代公式

$$x_{n+1} = f(x_n) \tag{2-3}$$

只要满足条件 $0 \leqslant x_n, x_{n+1} < M$,则由它所产生的数列必具有周期特性,即这个数列到一定长度之后,就要出现重复循环.循环的长度称为周期,记为 T,亦即对于任意的 $n < T, x_n + T = x_n$ 成立.显然,T 小于或等于 M.如果 $T = M$,便可得到一个全周期.因而对于一个随机数发生器来说,只要其产生的随机数的周期充分长,它就能够具有在(0,1)上均匀分布及相互独立的随机变量所需的各种统计性质.这样,从统计模拟来看,可以把它们当作真正的随机数使用.

下面介绍式(2-1)中三个参数以及初值 x_0 的选取方法.

(1) 模 M　选择 M 有两条原则,一是使 $\{x_n\}$ 能有尽可能长的周期,二是在计算机上使用时计算简便.在一台尾部字长为 K 的二进制计算机上,取 $M = 2^K$ 或 $M = 2^K \pm 1$,就可以满足这两个条件.如果 $M = 2^K$,则在 $c = 0$ 时,其周期最大可能为 2^{K-2},在 $c \neq 0$ 时为 2^K.一般计算机的 K 在30位以上,因此,2^{K-2} 已是一个足够大的数字(10^8 以上)了.在运算时,若要取以 2^K 为模的剩余,则只需在计算机上截取双字长乘积中低于 K 位的数字部分,即将 x_n 除以 $M = 2^K$ 得到 u_n,再对原数的阶码部分置零即可,所以计算十分简便.

(2) 增量 c　当 c 取不为零的适当数值时,虽有一些优点,例如容易保证最大周期为 $M = 2^K$,但由于 $M = 2^{K-2}$ 的周期一般已足够大,所以优点并不突出,故通常取 $c = 0$,此时式(2-1)所表示的方法称为**乘同余法**(multiplicative congruential).

(3) 初值 x_0　在 $c = 0$ 时,为了保证有最大周期,x_0 须取奇数,有时取1.每一个随机数发生器都有一个设定的 x_0,读者在使用之前应检查一下.

(4) 乘子 λ　研究结果表明,乘子 λ 对于获得长的周期和较好的统计性质是十分重要的.在 $c = 0$ 和 $M = 2^K$ 时,要保证有最大周期(即 $M/4$),乘子应取为 $\lambda = 8a \pm 3$ 或 $8a \pm 5$ 的形式.其中 a 为任意选定的正整数.在二进制计算机上,一般取 λ 为5的奇次幂.可以证明,这样的 λ 一定可以表示成 $8a - 3$ 的形式,即 $\lambda = -3 \pmod 8$.

若 $c = 0$ 且 M 为素数,则乘同余发生器的最长可能周期是 $M - 1$.这个周期可以达到,只需 λ 是一个元根,亦即 $\lambda \neq 0$,且若素数 p 整除 $M - 1$,则 $a^{(M-1)/p} \neq 1 \pmod M$.

显然,对于 $M = 2^K$ 的情形,有很多能满足最大可能周期要求的随机数发生器.例如,著名的IBM的随机数发生器RANDU,取 $M = 2^{31}, c = 0, \lambda = 2^{16} + 3 = 3 \pmod 8$.因此,RANDU有最大周期 $M/4 \approx 5 \times 10^8$,这是一个相当长的周期.但如此得到的"随机"数列破坏了一个独立同分布的 $\mathscr{U}(0,1)$ 样本所具有的均匀性和独立性.

随机数发生器的"魔术"在于:"长周期不是一个随机数发生器唯一所要的性质.好的伪随机数必需看似一个 i.i.d. 的 $\mathscr{U}(0,1)$ 随机样本的观测值."换句话说,一个好的随机数发生器必须同时在理论/结构上和经验/统计上都能通过所有检验(对实际应用是必须的),目的是检查其与均匀性或独立性或均匀性独立性的偏差.历史上,随着新的检验方法的提出,"被推荐的随机数发生器"因为不能通过这些检验而相继被废除,继而新的随机数发生器被提出;更新的检验方法的提出,又对新的随机数发生器提出挑战,如此反复.

一个严谨的模拟工作者的信条是:时刻留心你计算机里(免费)装入的随机数发生器.为了你的模拟问题,如果你不知道其性质的话,就要检验一下你手边的随机数发生器.若它通不过检验,就要找一个更好的发生器,或通过混合(shuffling)和下一章将要讨论的方法来改进已有的发生器.

最优线性同余随机数发生器(以后记为 LCG)或许是帕克(Park)和米勒(Miller)的"最低标准"发生器,普雷斯(Press)等人(1996)称之为"ran0".其取法如下:

$$\lambda = 7^5 = 16\ 807,\quad M = 2^{31} - 1 = 214\ 748\ 637,\quad c = 0.$$

虽然它由刘易斯(Lewis),古德曼(Goodman)和米勒于1969年首次提出,但该发生器通过了所有新的检验,而且更为重要的是,它已积累了大量的成功使用的例子.显然,$M = 2^{31} - 1$ 是素数.

当然,ran0 不是一个"十全十美"的发生器.没人宣称过任何发生器是"十全十美"的——最接近的描述是1994年马萨格利娅(G.Marsaglia)为其著作"Mother of all RNG's(mrg)"在网站 sci.math.num-analysis 上所做的广告之一.他宣称发现了一个长约为 2^{250} 的周期,并称它能通过所有常规的检验.一些用户竭力去确定他的说法的合理性.

几年来,马萨格利娅推出了许多广为人们接受的随机数发生器.mrg 是免费的,用户使用时要自担风险.

普雷斯等人(1996)推荐的随机数发生器,还有其他几种,它们或是由 LCG 推广的发生器,或是由一个或两个发生器经混合或交叉或数据编码方法而连接的随机数发生器.从这个意义上说,它们是由 ran0 改进的随机数发生器.作者推荐表 2-1 所示的随机数发生器.

表 2-1

随机数发生器	ran0	ran1	ran2	ran3	ran4
相应运算时间	= 1.0	≈ 1.2	≈ 2.0	≈ 0.6	≈ 4.0

对许多用途而言,ran0 已足够好了.如果对模拟的最终结果表示怀疑的话,则可试用 ran1 代替 ran0,看二者结果是否相似.ran1 在 ran0 的基础上多了一个混合(shuffle),因而使用方便.如果在一次计算中要产生多于 100 000 000 个随机数,则可选用 ran2,它在 ran1 的基础上又多了一个混合.克努特提出了 ran3,当运算速度显得特别重要,而又怀疑其他发生器在计算中引入了所不要的相关性时,可选用

ran3,它在运算时间上有优势,但使用时要小心.随机数发生器 ran4 能生成极好的伪随机数 —— 模拟要求精细时拿它作为备用.

3　随机数的检验和改善

伪随机数的质量如何,即它的性质究竟与真正的[0,1]上均匀分布的随机变量的简单随机样本的性质有无显著差异,是一个很重要的问题.如有显著差异,则以这种伪随机数为基础对给定随机变量所抽得的样本,实际上将不能反映该随机变量的性质,从而所得随机模拟的最后结果也将是不可靠的.因此对伪随机数进行检验,具有重要意义.

如前所述,现代的统计试验工作,都是在计算机上实现的,而计算机的软件人员,在编制生成伪随机数的子程序时,一般都是经过了一定的检验的.就这一方面来说,随机数的检验问题,在很大程度上是研究生成伪随机数新算法的数学工作者的任务.但是上述的检验,通常都是一般性的检验,即并非针对某种具体的应用情况而进行的检验,因而对于具体应用来说,还存在着根据应用问题的具体要求进行检验的问题.由于一个随机数列(或一种伪随机数的生成方法)即使通过了 T_1、T_2、…,T_n 等 n 种检验,但并不意味着一定能够通过 T_{n+1} 的检验,因而对于应用蒙特卡罗法的人来说,了解并掌握随机数检验的基本原理和方法是必要的.

随机数的检验有两类方法:经验/统计的方法和理论/结构的方法.前者采用某些统计检验方法来检验某个随机数发生器的输出结果(因而也就是经验结果).后者则是基于某个随机数发生器的一般结构或性质,对那些检验想得到的一个真实均匀随机样本的结构的方法进行检验(并非有某个随机数发生器产生一实数列,然后再检验它).本章只介绍最主要最有用的并且在计算机上容易实现的少数几种检验方法.

3.1　经验/统计检验方法

3.1.1　参数检验

随机数的**参数检验**,是检验该随机分布的参数的估计值与[0,1]上均匀分布的参数值(或称理论值)的差异是否显著.设

$$\{u_i\} = u_1, u_2, \cdots, u_n \tag{3-1}$$

是需要进行检验的一组随机数,其相应的随机变量记为 U.假设 U 是[0,1]上均匀分布的,则 U 的一阶矩、二阶矩和方差的估计量分别为

$$\overline{U} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} u_i,\quad \overline{U^2} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} u_i^2,$$

$$S^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(u_i - \frac{1}{2}\right)^2 = \overline{U^2} - \overline{U} + \frac{1}{4}. \tag{3-2}$$

经简单计算,可得它们的期望和方差:

$$
\begin{aligned}
E(\overline{U}) &= E(U) = \frac{1}{2}, \quad \mathrm{var}(\overline{U}) = \frac{\mathrm{var}(U)}{n} = \frac{1}{12n}, \\
E(\overline{U^2}) &= \frac{1}{3}, \quad \mathrm{var}(\overline{U^2}) = \frac{4}{45n}, \\
E(S^2) &= \frac{1}{12}, \quad \mathrm{var}(S^2) = \frac{1}{180n}.
\end{aligned}
\tag{3-3}
$$

根据极限定理可知,统计量

$$
U_1 = \frac{\overline{U} - E(\overline{U})}{\sqrt{D(\overline{U})}} = \sqrt{12n}\left(\overline{U} - \frac{1}{2}\right),
$$

$$
U_2 = \frac{1}{2}\sqrt{45n}\left(\overline{U^2} - \frac{1}{3}\right),
$$

$$
U_3 = \sqrt{180n}\left(S^2 - \frac{1}{12}\right),
$$

均渐近服从正态 $N(0,1)$ 分布. 于是只要有一数列式(3-1),即可算出上述诸 $U_i(i = 1,2,3)$ 的具体估计值,记为 $\hat{u}_i(i = 1,2,3)$. 如取显著水平 $\alpha = 0.05$,则当 $|\hat{u}_i| > 1.96$ 时,表示差异显著,应拒绝 U 为[0,1]上均匀分布的假设.

3.1.2　均匀性检验

均匀性检验(test for uniformity)又称频率检验,其目的是检验式(3-1)的随机数列的经验频率与理论频率的差异是否显著.

均匀性检验主要有如下方法.

1. 直方图法

从直方图图形上,可以清楚地检验伪随机数列 $\{u_i\} = u_1, u_2, \cdots, u_n$ 的直方图是否均匀.

与直方图对应的数值方法是 χ^2(卡方)拟合优度检验,下面介绍用 χ^2 拟合优度检验来检验其均匀性的方法.

把[0,1]区间分为 k 不相交的 k 个等子区间,按 u_i 取值的大小,把式(3-1)的数列分成 k 组. 设有 n_j 个随机数属于第 j 组,即式(3-1)中有 n_j 个 u_i 满足不等式

$$
\frac{j-1}{k} < u_i \leqslant \frac{j}{k}. \tag{3-4}
$$

假设 U 为[0,1]上的均匀分布,则落在每个小区间的概率 $p_j = \frac{1}{k}$,于是可得

$$
\chi_1^2 = \frac{k}{n}\sum_{j=1}^{k}\left(n_j - \frac{n}{k}\right)^2 \tag{3-5}
$$

渐近服从自由度为 $k-1$ 的 χ^2 分布。为了有效地使用 χ^2 分布,一般要求式(3-1)中样本容量 $n > 30$. 通常认为 n 应使 n/k 大于5. 在计算机上实际计算时,为使检验尽可能有效,n 往往要很大,例如 $n = 1\,000, 10\,000$,甚至 100 000.

对于一个具体数列式(3-1),按式(3-5)就可算出 χ^2 的值,将此数值和由 χ^2 分

布的临界值表中查得的临界值进行比较，如果 χ_1^2 的值小于 $\chi_{99\%}^2$ 和大于 $\chi_{1\%}^2$（例如，当 $k = 10$，自由度 $f = k - 1 = 9$ 时，$\chi_{99\%}^2 = 2.088$，$\chi_{1\%}^2 = 21.67$），则拒绝该数列．大于 $\chi_{1\%}^2$ 是由于不满足均匀性，小于 $\chi_{99\%}^2$ 是由于"过于"均匀，因而随机性不足．假设 χ_1^2 值在 $\chi_{99\%}^2 \sim \chi_{95\%}^2$ 之间，或在 $\chi_{5\%}^2 \sim \chi_{1\%}^2$ 之间，则认为数列是"可疑的"；在 $\chi_{95\%}^2 \sim \chi_{90\%}^2$ 之间，或在 $\chi_{10\%}^2 \sim \chi_{5\%}^2$ 之间，则认为数列是"几乎可疑的"．通常在做 χ^2 检验时，至少应该同时对三个不同的数列（同一种生成方法）进行 χ^2 检验，在三个结果中，只要有两个结果是可疑的，则应该认为这些数列（即该种生成方法）是不够均匀的．

2. *Q-Q* 图法

在 *Q-Q* 图上，可以把样本分位点（亦即 $u_1, u_2, \cdots, u_n$ 的次序统计量）与其期望分位点（亦即 $1/(n+1), 2/(n+1), \cdots, n/(n+1)$）对应作为 $\mathbf{R}^2$ 上的点描绘出来．若这些点都紧紧地落在由原点出发的45°射线附近，则随机数发生器通过此均匀性检验（***Q-Q* 图**）．

与 *Q-Q* 图对应的数值方法是科尔莫戈罗夫－斯米尔诺夫（Kolmogorov-Smirnov）检验，即

$$T = \max_{0 \leqslant x \leqslant 1} | F_n(x) - F(x) |,$$

其中 $F_n(x) = \frac{1}{n} \# \{u_i \leqslant x\}$ 是经验分布．若 T 的观测值大于临界值，则随机数发生器通不过检验．

3. *k* 重量法

检验 ***k*** 重量（k-tuples）$(u_1, u_2, \cdots, u_k)$，$(u_{k+1}, u_{k+2}, \cdots, u_{2k})$，…（记为 $\{(u_{ik+1}, u_{ik+2}, \cdots, u_{(i+1)k}), i = 0,1,2,\cdots\}$），看其是否在 k 维单位立方体 $[0,1]^k$ 中均匀分布是很重要的．k 的取法有2，3，4，5等，这取决于具体的应用问题．例如，$k = 3$ 对3维积分很重要．检验 k 重量，在图形上可以由检验2维直方图和3维或更高维的散布图完成．与之对应的数值方法是：将 $[0,1]^k$ 分割成小区域，数出点列 $(u_1, u_2, \cdots, u_k)$，$(u_{k+1}, u_{k+2}, \cdots, u_{2k})$，… 落在每个区域里的点数，然后进行 χ^2 拟合优度检验．

3.1.3 独立性检验

独立性检验（test for independence）主要检验式（3-1）数列前后各项的统计相关是否显著不为零．

独立性检验主要有如下方法．

1. 相关系数检验

从图上，可以检查 $\{u_i\}$ 的自相关图，看数列中是否有滞后1，2，… 相关．

从数值上，可以计算式（3-1）的数列前后相距为 j 的二项间的相关系数

$$r_j = \frac{\frac{1}{n-j}\sum_{i=1}^{n-j} u_i u_{i+j} - (\bar{u})^2}{S^2} \qquad (j = 1,2,\cdots), \tag{3-6}$$

其中S^2由式(3-2)给出,对充分大的n(如$n-j>50$),取零假设:$\rho=0$(即式(3-1)的数列是对U的独立抽样得到的),ρ为相关系数,则统计量

$$u=r_j\sqrt{n-j}$$

渐近服从正态$N(0,1)$分布.由此就可进行检验.

2. 列联表检验

列联表检验是在x-y平面上,将单位正方形分为k^2个相等的小正方形,把式(3-1)的随机数列按出现的先后顺序两两分组,如取

$$(u_1,u_{1+l}),(u_2,u_{2+l}),\cdots,(u_{n-l},u_n),(u_{n-l+1},u_1),\cdots,(u_n,u_l)$$

$$\left(l=1,2,\cdots,\frac{n}{2}\right) \tag{3-7}$$

进行检验,记落入小正方形(i,j)内的观测次数为$n_{ij}(i,j=1,2,\cdots,k)$,令

$$n_{i\cdot}=\sum_{j=1}^{k}n_{ij},\quad n_{\cdot j}=\sum_{i=1}^{k}n_{ij}, \tag{3-8}$$

根据独立性假设,统计量

$$\chi_2^2=n\left(\sum_{i,j=1}^{k}\frac{n_{ij}^2}{n_{i\cdot}\,n_{\cdot j}}-1\right) \tag{3-9}$$

渐近服从自由度为$(k-1)^2$的χ^2分布,由此即可进行检验.

3. 古特检验

古特(Good)检验主要检验式(3-1)的随机数列相邻两项的序列相关是否显著.其方法如下:同均匀性检验一样,将(0,1)分为k个相等的小区间,以n_{ij}表示前项落在第i个区间,后项落在第j个区间的项数,它相当于列联表检验中$l=1$时的n_{ij},则可计算如下的统计量:

$$\chi_3^2=\frac{k^2}{n}\sum_{i,j=1}^{k}\left(n_{ij}-\frac{n}{k^2}\right)^2. \tag{3-10}$$

古特证明,$\chi_3^2-\chi_1^2$渐近服从自由度为$k(k-1)$的χ^2分布.

除上述最常用的检验之外,还有许多其他检验,如组合规律性的检验(其中又包括距离检验、扑克(Poker)检验、配套检验等)、连检验(其中又有正负连检验、升降连检验等)、间断检验、子序列检验,等等.另外,所有上述的检验都属于"经验检验",或"先验检验",即通过对式(3-1)的数列生成方法的理论分析,可以事先(在算出具体数列之前)知道这些检验的结果如何.

3.1.4 均匀性和独立性同时检验

这主要有极大t(maximum of t)检验

极大t检验同时使用均匀性和独立性构造其检验统计量.其方法如下:

若$U_1,U_2,\cdots,U_t$是$\mathscr{U}(0,1)$的独立同分布的随机样本,则$V=\max\{U_1,U_2,\cdots,U_t\}^t$是$\mathscr{U}(0,1)$分布,因此,给定一个很大的随机数列$u_1,u_2,\cdots$,则极大$t$检验是针对$v_i=\max\{u_{i+1},u_{i+2},\cdots,u_{i+t}\}^t$, $i\geqslant1$的χ^2检验(而非3.1.2小节的1.中针对$\{u_i\}$的检验).

3.2　理论/结构检验方法

理论/结构检验方法比经验/统计检验方法更有效. 前者提供的有关生成方法的内容要比后者多得多. 很多差的随机数发生器能通过统计检验,但不能通过结构检验. 由于偶然性,有些试验数列可能通过结构检验,但不能通过统计检验. 在这种情况下,试验应该重复,而且应该对同一个随机数发生器所产生的另一试验数列进行检验.

理论/结构检验方法主要有如下两种方法.

1. 检验 k 重量的结构

这里的想法是从代数上研究一个随机数发生器的结构. 这就要求把$[0,1]^k$中不相交的u_i的k重量画出来. 例如,记$u_i = x_i/M$,著名的 RANDU 指出

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= 65\,539x_n(\bmod 2^{31}) = (2^{16}+3)x_n(\bmod 2^{31}) \to \\
x_{n+2} &= (2^{16}+3)^2x_n(\bmod 2^{31}) = (2^{32}+6\times 2^{16}+9)x_n(\bmod 2^{31}) \\
&= (6\times(2^{16}+3)-9)x_n(\bmod 2^{31}) = 6x_{n+1}-9x_n(\bmod 2^{31}).
\end{aligned}
$$

$$
\text{i.e.}\quad x_{n+2}-6x_{n+1}+9x_n = k\times 2^{31}. \tag{3-11}
$$

因此,三重量(x_n, x_{n+1}, x_{n+2})作为$\mathbf{R}^3$上的点画出来,落在平行的平面上. 显然有

$$
-6\times 2^{31} < x_{n+2}-6x_{n+1}+9x_n < 10\times 2^{31},
$$

所以式(3-11)中的整数k满足$-6<k<10$. 换句话说,RANDU 只在 15 个平面上产生u_i!

事实上,所有的最优线性同余发生器(LCG)都被限定在数目有限的平面上"如果一个LCG的k重量看作是$\mathbf{R}^k$上点的坐标,那么它们都将落在数目有限的超平面上. 对于每个k,这种平面数目的一个上界是$(k!M)^{1/k}$." 当$M=2^{32}$,$k=3$时,这个上界是2 959(与RANDU的15比较). 对一个32位的机器来说,2 959个平面(若能达到)在$\mathbf{R}^3$上可能是足够好的了. 但对某些高维应用问题,即使是最好的LCG也可能不够好. 总之,对于具体的应用问题,应该检验随机数发生器,如果它没能通过检验,就用耦合的随机数发生器,如 ran1,特别是直接求$[0,1]^k$上的积分.

2. 谱检验

对于LCG,k重量落在$\mathbf{R}^k$中的一有限族超平面上. 这族平行平面相互间的最小距离是$\mathbf{R}^k$上该随机数发生器"颗粒性"的度量之一. 谱检验要计算

$$
\nu_k = \min\{\sqrt{s_1^2+s_2^2+\cdots+s_k^2},\ s_1+\lambda s_2+\cdots+\lambda^{k-1}s_k = 0(\bmod M)\},
$$

$$
\mu_k = \frac{\pi^{k/2}\nu_k^k}{(\frac{k}{2})!M}\qquad (k=2,3,\cdots,6).
$$

若$\nu_k \geqslant 2^{30/k}$或$\mu_k \geqslant 0.1$或更好,则LCG通过谱检验. RANDU 相当难通过谱检验.

3.3 检验的局限性

上述统计检验都有一定的局限性. 首先由所述检验内容(如频率检验、序列相关检验等)可以看出,这些检验都是对一般性问题的检验,并未具体地联系到应用问题的具体要求进行检验. 对于不同的应用情况,显然应该对检验提出不同的要求,如在水文统计中,在研究有关百年难遇的洪水问题时,小概率发生的情况就具有重要意义,因此,对小概率的性质,就应做必要的检验. 其次,从理论上说,对于一个数列,即使已通过多种检验,但仍存在如下可能:它实际上存在某种不够理想的统计性质,但未被检验出来.

3.4 改善随机数发生器

目前有两种方法可改善随机数发生器:第一种是使用反馈移位-记录(feedback shift-register)发生器(简称FSRG发生器),另一种是耦合的随机数发生器. 两类发生器都是LCG的推广.

3.4.1 反馈移位-记录发生器

反馈移位-记录发生器定义为

$$x_t = (a_1 x_{t-1} + a_2 x_{t-2} + \cdots + a_d x_{t-d}) \quad (\mathrm{mod} M), \tag{3-12}$$

其中$a_d \neq 0$. 显然,这个发生器与如下的多项式有关:

$$f(x) = x^d + a_1 x^{d-1} + \cdots + a_d.$$

若f不可约,则此发生器的周期为$2^d - 1$. 在计算式(3-12)时,陶斯沃特(Tausworthe)[9]建议在每个位元上取$M = 2$,因而对于$i = 1,2,\cdots,d-1$, $a_i = 0$或1, $a_d = 1$. 为了从$\{x_i\}$中得到$[0,1]$上的数,可以选取一个整数L,然后把$\{x_i\}$分成L重量,并令

$$u = \frac{x_1}{2} + \frac{x_2}{2^2} + \cdots + \frac{x_L}{2^L}.$$

通常取$L = 31$,或者计算机的词汇量. FSRG发生器的好处在于它能产生高维的均匀分布(与LCG比较). 为简单起见,大多数FSRG发生器都基于三项式:

$$f(x) = 1 + x^q + x^p,$$

其中$1 \leqslant q < p = d$,且应选取(p,q)使得f不可约. 例如,若$(p,q) = (31,7)$,则f不可约. 有关(p,q)的其他取法,可参阅文献[7].

3.4.2 耦合随机数发生器

耦合随机数发生器可以通过用一个发生器与自身或另一个发生器混合或交叉得到.

1. 混合方法

一个简单的混合是置换$\{u_i\}$的每个L重量. 这个方法解决了RNADU中的问

题. 另一个常用的**混合方法**如下.

令$\{u_i\}$和$\{v_i\}$分别是来自两个随机数发生器的输出. 给一个k元表赋初值: $T_i = u_i, i = 0,1,\cdots,i-1$, 则

$$\text{循环}: \{\text{产生下一个 } u_n, v_n$$

$$\text{令 } j = \lceil kv_n \rceil, \quad r_n = T_j, T_j = u_n \}$$

其中$\lceil \cdot \rceil$是取整函数. 对于只有一个随机数发生器的自混合(self-shuffling)方法, 只须在上面的算法中取$r_n = u_n$即可.

2. 交叉方法

给定输出$\{x_i\}$, $\{y_i\}$(这里$u_i = x_i/M, v_i = y_i/M$). 定义一个新输出

$$r_i = x_i \text{XOR} y_i,$$

其中XOR是二进制数位(bit)意义下的"异或"(EOR)算子, 即若x和y的二进制数位分别为a和b, 则$x\text{XOR}y = a\text{EOR}b = (a+b)(\text{mod}2)$. 此算法用C语言容易执行, 但用Fortran语言要困难些.

一般来说, 对差的随机数发生器进行混合有改善作用; 对好的随机数发生器进行混合, 可能有改善作用, 也可能起损害作用, 但肯定能加长周期.

总之, 除了上述介绍的ran0, ran1, …, ran4外, 手边的一个随机数发生器是否合适取决于所要求的应用问题. 例如, 对于一个大的维数d, 如果模拟集中于$\mathbf{R}^d$上的一个小区域, 那么LCG的平面性质就会是很严重的问题. 如果怀疑一个随机数发生器的结果, 那么用混合或交叉方法来改善之, 或用另一个随机数发生器. 对系统提供的随机数发生器要时刻留心, 即使它们是得到改善了的. 数值计算程序和商用数值计算软件库, 如NAG和IMSL, 通常都有相当好的不断更新的随机数发生器. 选定一个随机数发生器后, 模拟量的大小不应该超过该发生器周期的平方根.

4 随机变量或随机向量的抽样

有了$[0,1]$上均匀分布的随机数序列$\{u_i\}$之后, 还必须给出具体方法, 以便能利用这一序列得到指定分布的随机变量或随机向量的独立随机样本.

4.1 随机变量的抽样

随机变量的抽样方法有很多, 有些是一般性的方法, 有些是针对各种应用问题的特殊方法. 三种一般性的方法是: 变换、舍弃和均匀比. 另外, 在下面的讨论中, 除特别注明为离散随机变量的抽样外, 都是对连续随机变量而言的.

4.1.1 变换方法

变换方法(transformation method)把所研究的随机变量X与另一个(或多个相互独立的)随机变量U建立某种函数关系, 利用这种关系就可由u得到x.

1. 利用单一随机数的变换

设连续型随机变量 X 的分布函数为 $F(x)$，易知 $U = F(X)$ 是[0,1]上均匀分布的随机变量. 假定 $F(x)$ 是严格单调的，则有

$$X = F^{-1}(U),$$

其中 F^{-1} 为 F 的反函数. 因此，对于任意分布 F，如果 F^{-1} 有解析表达式，则可以通过计算 $x = F^{-1}(u)$ 来产生分布服从 F 的随机变量 X. 对于一些简单分布，连续随机变量 X 的一些抽样公式如表4-1所示.

表4-1

名　　称	X 的分布函数 $F(x)$	X 的密度函数 $f(x)$	抽样公式 $X = F^{-1}(U)$	X 的取值区间	备　　注
均匀分布	$\frac{x-b}{a}$	$\frac{1}{\lvert a \rvert}$	$aU + b$	$[b, b+a]$ $[b+a, b]$	$a > 0$ $a < 0$
特殊贝塔分布	$x^{\frac{1}{n}}$	$\frac{1}{n}x^{\frac{1}{n}-1}$	U^n	$[0,1]$	
特殊贝塔分布	x^n	nx^{n-1}	$U^{\frac{1}{n}}$	$[0,1]$	
指数分布	$1 - e^{-\lambda x}$	$\lambda e^{-\lambda x}$	$-\frac{1}{\lambda}\ln U$	$(0, \infty)$	$\lambda > 0$
	$\frac{\ln x}{\ln \lambda}$	$\frac{1}{x\ln\lambda}$	λ^U	$[1, \lambda]$	$\lambda > 1$
	$\frac{1}{\pi}\arcsin x$	$\frac{2}{\pi\sqrt{1-x^2}}$	$\sin(\pi U)$	$[0,1]$	
柯西分布	$\frac{1}{\pi}\mathrm{arctg}x + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{\pi(1+x^2)}$	$\mathrm{tg}(\pi(U - \frac{1}{2}))$	$(-\infty, \infty)$	
	$\sin x$	$\cos x$	$\arcsin U$	$[0, \frac{\pi}{2}]$	

当 $F(x)$ 的函数形式比较复杂，F^{-1} 不能用显式表达时，可以用数值方法求出 $x = F^{-1}(u)$.

这种抽样方法又称逆方法. 通常在 F^{-1} 有简单确定的形式下使用.

2. 利用多个随机数的变换

设 U_1, U_2 为两个相互独立的满足均匀分布的随机变量. 考虑 U_1, U_2 的如下函数：

$$\begin{cases} X = g_1(U_1, U_2), \\ Y = g_2(U_1, U_2). \end{cases} \tag{4-1}$$

假设函数 g_1, g_2 的逆变换存在，记为 h_1, h_2，即

$$\begin{cases} U_1 = h_1(X_1, X_2), \\ U_2 = h_2(X_1, X_2). \end{cases} \tag{4-2}$$

设 $g(x,y)$,$f(u_1,u_2)$ 分别表示(X,Y) 和(U_1,U_2) 的联合分布密度,则由概率理论可知,f 与 g 有如下关系:

$$g(x,y) = f(u_1,u_2) \cdot |J|, \tag{4-3}$$

其中

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{\partial u_1}{\partial y} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial y} \end{vmatrix} \tag{4-4}$$

为变换的雅可比(Jacobi)行列式.由于 $f(u_1,u_2)$ 满足

$$f(u_1,u_2) = \begin{cases} 1 & (0 \leqslant u_1 \leqslant 1, 0 \leqslant u_2 \leqslant 1), \\ 0 & (\text{其他}). \end{cases} \tag{4-5}$$

于是 $g(x,y) = |J|$.利用这一关系,有时可以得到很方便的抽样方法.

例 1 利用变换方法生成标准正态分布的随机变量.设对随机数 U_1,U_2 做下列变换:

$$\begin{aligned} N_1 &= \sqrt{-2\ln U_1}\cos(2\pi U_2), \\ N_2 &= \sqrt{-2\ln U_1}\sin(2\pi U_2), \end{aligned} \tag{4-6}$$

证明 N_1,N_2 为相互独立的服从 $N(0,1)$ 分布的随机变量.

证 由式(4-6),得逆变换:

$$\begin{aligned} U_1 &= \exp\left\{-\frac{1}{2}(N_1^2 + N_2^2)\right\}, \\ U_2 &= \frac{1}{2\pi}\left\{\operatorname{arctg}\left(\frac{N_2}{N_1}\right) + c\right\}. \end{aligned} \tag{4-7}$$

于是可得

$$\frac{\partial u_1}{\partial n_1} = -n_1\exp\left\{-\frac{1}{2}(n_1^2+n_2^2)\right\}, \quad \frac{\partial u_1}{\partial n_2} = -n_2\exp\left\{-\frac{1}{2}(n_1^2+n_2^2)\right\},$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial n_1} = -\frac{1}{2\pi}\frac{n_2}{n_1^2+n_2^2}, \quad \frac{\partial u_2}{\partial n_2} = \frac{1}{2\pi}\frac{n_1}{n_1^2+n_2^2}.$$

故

$$|J| = \frac{1}{2\pi}\exp\left\{-\frac{1}{2}(n_1^2+n_2^2)\right\}.$$

于是

$$g(n_1,n_2) = |J| = \frac{1}{2\pi}\exp\left(-\frac{n_1^2}{2}\right) \cdot \frac{1}{2\pi}\exp\left(-\frac{n_2^2}{2}\right). \tag{4-8}$$

所以 N_1,N_2 相互独立服从标准正态分布.

由式(4-6)给出的生成方法是著名的博克斯 - 马勒(Box-Müller)方法.有了均匀随机数的发生器,就很容易编程计算了.

另外，利用随机变量和、积、商的分布，还可以得出以下几个有用的结果.

1° n 个随机变量 U_i 之和 $S_n = \sum_{i=1}^{n} U_i$ 的密度函数为

$$f_s(x) = \frac{1}{(n-1)!}\sum_{i=0}^{l}(-1)^i C_n^i (x-i)^{n-1}$$

$$(l < x \leqslant l+1, l = 0,1,2,\cdots,n-1). \tag{4-9}$$

2° n 个随机变量 U_i 之积 $\eta_n = \prod_{i=1}^{n} U_i$ 的密度函数为

$$f_\eta(x) = \frac{(-\ln x)^{n-1}}{(n-1)!} \qquad (0 < x \leqslant 1). \tag{4-10}$$

3° 两个随机变量 U_1, U_2 之商 $\xi = U_2/U_1$ 的密度函数为

$$f_\xi(x) = \begin{cases} 0 & (x \leqslant 0); \\ \dfrac{1}{2} & (0 < x \leqslant 1); \\ \dfrac{1}{2x^2} & (1 < x < \infty). \end{cases} \tag{4-11}$$

4° n 个随机变量 U_i 的对数之和 $X = -\sum_{i=1}^{n}\ln U_i = -\ln\prod_{i=1}^{n} U_i$ 的密度函数为

$$f_X(x) = \frac{1}{\Gamma(n)} x^{n-1} e^{-x} \qquad (x \geqslant 0),$$

其中

$$\Gamma(n) = (n-1)!.$$

利用以上结果可得到一些已知分布的抽样值，例如，设已知 X 服从式(4-9)，则可用 $x = \sum_{i=1}^{n} U_i$ 来得到 X 的抽样值. 要产生密度函数为

$$f(x) = \frac{\lambda^r}{\Gamma(r)} x^{r-1} e^{-\lambda x} \qquad (x > 0)$$

的伽玛分布，则要令

$$Y = \frac{X}{\lambda} = -\frac{1}{\lambda}\sum_{i=1}^{r}\ln U_i,$$

其中 λ 称为刻度参数；r 称为形状参数.

4.1.2 舍选抽样方法

产生随机变量的**舍选抽样方法**(rejection/acceptance method)，是根据满足一定的检验条件进行舍选，以得到所需要随机变量的抽样值的方法. 由于舍选抽样方法灵活、计算简单、使用方便，所以得到较为广泛的应用.

1. 最简单的舍选抽样方法

假设 $X \sim \mathrm{pdf} f(x)$，其中 $f \leqslant c$，且 f 具有有界支撑，记为 $[a,b]$. 舍选抽样的想法是：产生 $[a,b]\times[0,c]$ 上的均匀随机向量，然后只接受在由函数 $f(x)$ 确定的曲线以下的点. 该方法的步骤如下：

(1) 独立地产生 $Y \sim \mathscr{U}[a,b]$ 和 $Z \sim \mathscr{U}[0,c]$;

(2) 若 $Z \leqslant f(Y)$,则取 Y 作为 X 的输出,即令 $X = Y$,否则,转回第(1)步.

容易证明,X 的密度函数确实是 $f(x)$.

显然,在矩形区域 $[a,b] \times [0,c]$ 内,曲线 $f(x)$ 以上的面积越大,则舍弃率越高.因此,更有效的舍选抽样方法是,基于某个控制函数,使得控制函数和密度函数 $f(x)$ 之间的面积很小.这便引出下面的广义舍选抽样方法.

2. 广义舍选抽样方法

令 g 是另一概率密度函数,$M > 0$,使得 $f \leqslant Mg$,Mg 是控制函数.其计算步骤如下:

(1) 先产生 $Y \sim g$,然后对 $c = Mg(Y)$ 产生 $Z \sim \mathscr{U}[0,c]$,依次进行;

(2) 若 $Z \leqslant f(Y)$,则取 Y 作为 X 的输出,否则,转回第(1)步.

此广义舍选抽样方法不要求 f 有有界支撑,也不要求 f 有界.此外,f 甚至不必正规化为概率密度函数,这样,使用者就可避免在计算中求出某些复杂的常数.对于一个适当的 g,舍选方法的效率可以非常高.该效率为

$$P\{Z \leqslant f(Y)\} = \frac{1}{M},$$

当 g 靠近 f 时,它趋近于 1.在简单舍选抽样中,$g(x) = 1/(b-a)$,$Mg(x) = c$;因此效率为 $1/M = 1/[c(b-a)]$.在实际应用中,除了要选取 g 靠近 f 外,g 也应该可以很快很容易产生.

例 2 (贝塔分布) 称 X 服从 $\mathrm{B}(\alpha,\beta)$ 分布,若 X 具有概率密度函数:

$$f(x) = \frac{1}{\mathrm{B}(\alpha,\beta)} x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1} \quad x \in (0,1),$$

其中 $\mathrm{B}(\alpha,\beta) = \int_0^1 x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}\mathrm{d}x$,即参数为 $\alpha,\beta \geqslant 0$ 的贝塔函数.为简单起见,假设 $\beta \geqslant 1$.这里滥用记号,去掉常数 $\mathrm{B}(\alpha,\beta)$,取 $f(x) = x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}$,则

$$f(x) \leqslant x^{\alpha-1} \qquad (x \in (0,1)).$$

令 $Mg(x) = x^{\alpha-1}$,则为使 g 的积分为 1,M 必须取为 $1/\alpha$.因为 g 的分布函数为 $G(x) = x^{\alpha}$,Y 可以由定义 $Y = G^{-1}(U) = U^{1/\alpha}$ 产生,其中 $U \sim \mathscr{U}(0,1)$.一个简单的算法如下:

(1) 产生 $U \sim \mathscr{U}[0,1]$,令 $Y = U^{1/\alpha}$,产生 $Z \sim \mathscr{U}[0,c]$,$c = Mg(Y) = Y^{\alpha-1}$;

(2) 若 $Z \leqslant Y^{\alpha-1}(1-Y)^{\beta-1}$,则取 Y 作为 X 的输出.否则,转回第①步.

4.1.3 均匀比方法

对于任意 $h \geqslant 0$,$\int h(x)\mathrm{d}(x) < \infty$,令

$$C_h = \left\{(u,v): 0 \leqslant u \leqslant \sqrt{h\left(\frac{v}{u}\right)}\right\}.$$

那么,若 (U,V) 在 C_h 上均匀分布,则 V/U 具有概率密度函数 $h(x)\Big/\int h(x)\mathrm{d}x$.

这一结果在 $C_h \in [0,a] \times [b_1,b_2]$ 时非常有用.均匀比方法(ratio of uniform)

有如下算法：

(1) 独立地产生 $U_1 \sim \mathscr{U}[0,a]$ 和 $U_2 \sim \mathscr{U}[b_1,b_2]$，直到 $(U_1,U_2) \in C_h$；

(2) 输出 $X = U_2/U_1$.

例 3 （柯西(Cauchy)分布） 取 $h(x) = 1/(1+x^2)$，则

$$C_h = \{(u,v):0 \leqslant u \leqslant \sqrt{1/(1+(\frac{v}{u})^2)}\} = \{(u,v):u^2+v^2 \leqslant 1\}.$$

在上面的算法中取 $a = 1, b_1 = -1, b_2 = 1$ 即可.

下面要介绍的方法属于特殊方法类型，它们在密度函数有特殊结构时有用.

4.1.4 离散方法

令 X 为一离散随机变量，有 $P(X = a_i) = p_i, i = 1,2,\cdots$，且 $\sum pi = 1$. 生成这样的随机变量的一个简单方法是：

(1) 产生 $U \sim \mathscr{U}[0,1]$；

(2) 若 $\sum_{j=1}^{k-1} p_j < U \leqslant \sum_{j=1}^{k} p_j$，则输出 $X = a_k$，

这种方法称为**离散方法**.

4.1.5 混合方法

若 X 来自于一个密度为 $f(x) = \sum_{i=1}^{r} p_i f_i(x)$ 的混合分布，其中 f_i 是概率密度函数，$\sum_{i=1}^{r} p_i = 1$，则 X 可由如下方式产生：

(1) 基于 $(p_1,p_2,\cdots,p_r)$，从 $(1,2,\cdots,r)$ 中随机抽取一整数 I；

(2) 从 f_I 中抽样，将之定义为输出量 X，

这种方法称为**混合方法**.

例 4 计算两个正态的混合.

要产生

$$X \sim \frac{1}{2}\phi(x) + \frac{1}{2}\phi(x-\mu),$$

其中 ϕ 是标准正态密度函数，可用以下算法：

(1) 独立地产生 $N \sim \mathscr{N}(0,1), U \sim \mathscr{U}(0,1)$；

(2) 若 $U \leqslant 1/2$，则令 $X = N$，若 $U > 1/2$，则令 $X = N + \mu$.

4.1.6 连续随机变量的抽样公式表

对于连续随机变量，除表 4-1 所列的一些简单情况外，根据上面介绍的方法，还可以列出若干抽样公式，如表 4-2 所示. 其中 u_i, n_i, ε_i 分别表示[0,1]上均匀分布、标准正态分布及 $\lambda = 1$ 的指数分布的随机数.

表 4-2

分布名称	概率函数 $P(X=x)$ 或密度函数 $f(x)$	抽样公式
指数分布	$\lambda\exp(-\lambda(x-t))\quad(x\geqslant t)$	$x=-\ln u/\lambda+t$
标准正态分布	$\frac{1}{2\pi}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$	$n_1=\sqrt{-2\ln u_1}\cos(2\pi u_2)$ 或 $n_2=\sqrt{-2\ln u_1}\sin(2\pi u_2)$
χ^2 分布	$\frac{1}{2^{\frac{m}{2}}\Gamma(\frac{m}{2})}x^{\frac{m}{2}-1}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)\quad(x>0)$	$x=\sum_{i=1}^{m}n_i^2$ $m=2k$ 时，$x=-2\ln(\prod_{i=1}^{k}u_i)=2\sum_{i=1}^{k}\epsilon_i$
Γ 分布	$\frac{\lambda^\eta}{\Gamma(\eta)}x^{\eta-1}\exp(-\lambda x)\quad(x>0)$	η 为整数时，$x=-\sum_{i=1}^{\eta}\frac{\ln u_i}{\lambda}=\sum_{i=1}^{\eta}\frac{\epsilon_i}{\lambda}$
对数正态分布	$\frac{\exp\{-[\ln(x-a)+b]^2/(2\sigma^2)\}}{\sqrt{2\pi}\sigma(x-a)}$	$x=a+\exp(\sigma n-b)$
贝塔分布	$\frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\cdot\Gamma(\beta)}x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}$ $(0<x<1)$	$x=\sum_{i=1}^{2\alpha}n_i^2/(\sum_{i=1}^{2\alpha}n_i^2+\sum_{i=2\alpha+1}^{2\alpha+2\beta}n_i^2)$ α,β 皆为整数
韦布尔分布	$\frac{\alpha}{(\beta-t)^\alpha}(x-t)^{\alpha-1}\cdot\exp\left\{-\frac{(x-t)^\alpha}{(\beta-t)^\alpha}\right\}$ $(x\geqslant t)$	$x=(\beta-t)(-\ln u)^{1/\alpha}+t$
泊松分布	$\frac{\lambda^x\exp(-\lambda)}{x!}$	$x=k$，k 是满足 $\prod_{i=1}^{k+1}u_i<\exp(-\lambda)$ 的最小整数
二项分布	$\binom{n}{x}p^x(1-p)^{n-x}$	$x=\sum_{i=1}^{n}k_i,\quad k_i=\begin{cases}0, & u_i<p,\\ 1, & u_i\geqslant p\end{cases}$

4.2　随机向量的抽样

设随机向量 $\boldsymbol{\eta}=(\eta_1,\eta_2,\cdots,\eta_n)^{\mathrm{T}}$ 具有联合密度函数 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，若随机向量 $\boldsymbol{\eta}$ 的各个分量相互独立，则可利用前面给出的各种抽样方法，对分量 $\eta_1,\eta_2,\cdots,\eta_n$ 分别地进行抽样．但在实际应用中，$\boldsymbol{\eta}$ 的各个分量多是相关的，它们的抽样方法比较起来相对要复杂一些．下面简单说明随机向量的一般抽样方法和正态随机向量的抽样方法．

4.2.1 随机向量的一般抽样方法

随机向量抽样中，常用的一般抽样方法有条件密度法、舍选法和函数变换法等。它们大都是前述随机变量抽样方法向多维的推广。为简单计，下面以二维或三维随机向量为例，讨论随机向量的一般抽样方法。在向高维推广时，方法是类似的。

1. 条件密度法

设随机向量 $\boldsymbol{\eta}=(\eta_1,\eta_2,\eta_3)^{\mathrm T}$ 的联合密度函数为 $f(x,y,z)$，则 η_1,η_2,η_3 分别具有边缘密度函数和条件密度函数：

$$f_1(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x,y,z)\mathrm{d}y\mathrm{d}z, \tag{4-12}$$

$$f_2(y\mid x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x,y,z)}{f_1(x)}\mathrm{d}z, \tag{4-13}$$

$$f_3(z\mid x,y)=\frac{f(x,y,z)}{f_1(x)f_2(y\mid x)}, \tag{4-14}$$

$f(x,y,z)$ 可以表示为

$$f(x,y,z)=f_1(x)f_2(y\mid x)f_3(z\mid x,y). \tag{4-15}$$

随机向量 $\boldsymbol{\eta}$ 的抽样过程是通过一串随机变量的抽样来实现的。抽样过程是：先由边缘分布 $f_1(x)$ 产生随机变量 η_1 的抽样值 x；固定 x，由条件密度 $f_2(y\mid x)$ 产生随机变量 η_2 的抽样值 y；固定 x,y，由条件密度 $f_3(z\mid x,y)$ 产生随机变量 η_3 的抽样值 z；这样得到的 $(x,y,z)^{\mathrm T}$ 就是随机向量 η 的一个抽样值。这就是**条件密度法**。在实际应用中，要得到一组易于产生随机向量 $\boldsymbol{\eta}_i$ 的抽样值的条件密度函数组式(4-14)是比较困难的。

例 5 设 (X,Y) 为二元对数正态分布。利用条件密度法对 (X,Y) 进行抽样。

解 由概率论知，二元对数正态分布的密度函数为

$$f(x,y)=\frac{1}{\sigma_1\sigma_2 2\pi\sqrt{1-r^2}\,(x-\beta_1)(y-\beta_2)}\exp\left(-\frac{1}{2(1-r^2)}\left(\left(\frac{\ln(x-\beta_1)-\mu_1}{\sigma_1}\right)^2-2r\left(\frac{\ln(x-\beta_1)-\mu_1}{\sigma_1}\right)\left(\frac{\ln(y-\beta_2)-\mu_2}{\sigma_2}\right)+\left(\frac{\ln(y-\beta_2)-\mu_2}{\sigma_2}\right)^2\right)\right)$$

$$(x>\beta_1,y>\beta_2,|r|\leqslant 1), \tag{4-16}$$

其中 $\mu_1,\beta_1,\sigma_1,\mu_2,\beta_2,\sigma_2,r$ 为参数。

由此易知 X、Y 的边缘分布为三参数的对数正态分布：

$$f_1(x)=\frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}\,(x-\beta_1)}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(x-\beta_1)-\mu_1}{\sigma_1}\right)^2\right)\qquad(x>\beta_1),$$

$$f_2(y)=\frac{1}{\sigma_2\sqrt{2\pi}\,(y-\beta_2)}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(y-\beta_2)-\mu_2}{\sigma_2}\right)^2\right)\qquad(y>\beta_2).$$

两个条件分布分别为

$$f_1(x\mid y)=\frac{1}{(x-\beta_1)\sigma'_1\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(x-\beta_1)-\mu'_1}{\sigma'_1}\right)^2\right),$$

$$f_2(y \mid x) = \frac{1}{(y-\beta_2)\sigma'_2\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(y-\beta_2)-\mu'_2}{\sigma'_2}\right)^2\right),$$

其中
$$\sigma'_1 = \sigma_1\sqrt{1-r^2};\sigma'_2 = \sigma_2\sqrt{1-r^2}; \tag{4-17}$$

$$\mu'_1 = \mu_1 + r\frac{\sigma_1}{\sigma_2}(\ln(y-\beta_2)-\mu_2); \tag{4-18}$$

$$\mu'_2 = \mu_2 + r\frac{\sigma_2}{\sigma_1}(\ln(x-\beta_1)-\mu_1). \tag{4-19}$$

令
$$\xi = \frac{\ln(x-\beta_1)-\mu_1}{\sigma_1}, \eta = \frac{\ln(y-\beta_2)-\mu_2}{\sigma_2}, \tag{4-20}$$

也即是
$$x = \exp(\sigma_1\xi + \mu_1) + \beta_1, \tag{4-21}$$
$$y = \exp(\sigma_2\eta + \mu_2) + \beta_2. \tag{4-22}$$

由概率论易知,(ξ,η) 为相关系数,是 r 的二元标准正态分布.由此可得到生成(X, Y)样本的步骤如下:

(1) 先给定或由实测资料估计出式(4-16)中的七个参数,

(2) 生成一对随机数 u_i, u_{i+1},

(3) 由(u_i, u_{i+1})利用表 4-2 中 $n_1 = \sqrt{-2\ln u_1}\cos(2\pi u_2)$ 生成标准正态(n_i, n_{i-1})分布,

(4) 以 n_i 代替式(4-20)中的 ξ,得到 x_i,

(5) 将 x_i 代入式(4-19),得到 μ'_2,由式(4-17)得到 σ'_1,

(6) 以 $n_{i-1}, \mu'_2, \sigma'_2$ 分别代替式(4-22)中的 η, μ_2 和 σ_2,得到的 y_i,y_i 就是在 $X = x_i$ 条件下 Y 的生成值.于是(x_i, y_i)即为(X, Y)的一对生成值.

应该指出,以上举例主要在于说明如何使用条件分布.对于对数正态分布的生成,利用下面 3. 中介绍的方法,将更为简便.

2. 舍选抽样

随机向量的舍选抽样方法是一维的最简单的舍选抽样方法的直接推广,其证明的方式也完全类似.

设随机向量 $\boldsymbol{\eta}$ 在平行多面体 $a_i \leqslant x_i \leqslant b_i (i = 1,2,\cdots,n)$ 上具有密度函数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$,上界

$$f_0 = \sup_{\substack{a_i < x_i \leqslant b_i \\ i=1,\cdots,n}} f(x_1, x_2, \cdots, x_n) \tag{4-23}$$

取有限值.产生随机数 $u_0, u_1, \cdots, u_n$,若

$$f_0 u_0 < f((b_1 - a_1)u_1 + a_1, \cdots, (b_n - a_n)u_n + a_n) \tag{4-24}$$

成立,则

$$\boldsymbol{\eta} = ((b_1 - a_1)u_1 + a_1, \cdots, (b_n - a_n)u_n + a_n)^{\mathrm{T}}. \tag{4-25}$$

舍选抽样的效率为

$$p = \frac{1}{f_0\prod_{i=1}^{n}(b_i - a_i)}. \tag{4-26}$$

随着向量维数的增加，p 急速下降，所以多维分布的舍选方法一般是低效率的.

4.2.2 正态随机向量的抽样

若随机向量 $\boldsymbol{X} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$ 以

$$f(x_1, x_2, \cdots, x_n) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \mid \boldsymbol{M} \mid^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{a})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{M}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{a})\right\} \tag{4-27}$$

为密度函数，则 $\boldsymbol{X}$ 为 n 维正态随机向量，其中

$$\boldsymbol{a} = E(\boldsymbol{X}) = (a_1, a_2, \cdots, a_n)^{\mathrm{T}}$$

是 $\boldsymbol{X}$ 的数学期望；$\boldsymbol{M}$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的协方差阵，即

$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} & \cdots & \mu_{1n} \\ \mu_{21} & \mu_{22} & \cdots & \mu_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mu_{n1} & \mu_{n2} & \cdots & \mu_{nn} \end{bmatrix}, \tag{4-28}$$

其中 $\mu_{ij} = \mu_{ji} = E((X_i - a_i)(X_j - a_j))$；$\mid \boldsymbol{M} \mid$ 为正定协方差阵的行列式.

当 $\boldsymbol{a} = 0$，$\boldsymbol{M}$ 为 n 阶单位矩阵时，随机向量 $\boldsymbol{X}$ 的各个分量相互独立地服从正态 $N(0,1)$ 分布. 这时的 $\boldsymbol{X}$，用 $\boldsymbol{Y}$ 表示之，用前述的有关方法可以产生 $\boldsymbol{Y}$ 的抽样值. 在一般情况下，$\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Y}$ 存在如下变换关系：

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{Y} + \boldsymbol{a}. \tag{4-29}$$

线性变换矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{M}$ 的关系是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{M}$. 下面给出一种变换. 取变换矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为下三角矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \tag{4-30}$$

这样计算比较简单. 这时 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{M}$ 是有名的 Cholesky 分解，元素 a_{ij} 可按列依次进行计算：

$$a_{ij} = \frac{\mu_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} a_{ik} a_{jk}}{\left(\mu_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk}^2\right)^{1/2}} \quad (i, j = 1, 2, \cdots, n), \tag{4-31}$$

其中
$$\sum_{k=1}^{0} a_{ik} a_{jk} = 0; \quad \sum_{k=1}^{0} a_{jk}^2 = 0.$$

求出矩阵 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 之后，即可由式(4-29)得出 $\boldsymbol{X}$ 的抽样值. 为清楚起见，可把式(4-29)写成普通形式，即

$$\begin{cases} x_1 = a_{11}y_1 + a_1, \\ x_2 = a_{21}y_1 + a_{22}y_2 + a_2, \\ x_3 = a_{31}y_1 + a_{32}y_2 + a_{33}y_3 + a_3, \\ \vdots \\ x_i = a_{i1}y_1 + a_{i2}y_2 + \cdots + a_{ii}y_i + a_i, \\ \vdots \\ x_n = a_{n1}y_1 + a_{n2}y_2 + \cdots + a_{nn}y_n + a_n. \end{cases} \tag{4-32}$$

例 6 模拟数学期望为 0,协方差阵为

$$M = \begin{bmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} \\ \mu_{21} & \mu_{22} \end{bmatrix}$$

的二维正态随机向量 X.

根据式(4-31),线性变换矩阵 A 的元素为:

$$\begin{cases} a_{11} = \sqrt{\mu_{11}}, a_{12} = 0, \\ a_{21} = \dfrac{\mu_{21}}{a_{11}} = \dfrac{\mu_{21}}{\sqrt{\mu_{11}}}, \\ a_{22} = (\mu_{22} - a_{21}^2)^{1/2} = \sqrt{\dfrac{(\mu_{11}\mu_{22} - \mu_{12}^2)}{\mu_{11}}}. \end{cases}$$

由式(4-32),得到 X 的抽样公式:

$$\begin{cases} X_1 = \sqrt{\mu_{11}}Y_1, \\ X_2 = \dfrac{1}{\sqrt{\mu_{11}}}(\mu_{21}Y_1 + \sqrt{\mu_{11}\mu_{22} - \mu_{12}^2}\,Y_2), \end{cases}$$

其中 Y_1, Y_2 为相互独立的服从标准正态分布的随机变量,可用前述的任何方法,例如用 $n_1 = \sqrt{-2\ln u_1}\cos(2\pi u_2)$ 来生成.

例 7 设 n 元正态随机向量 X 的相关矩阵由下式给出:

$$\mu_{ij} = \sigma^2\exp(-\beta\,|\,i-j\,|) \qquad (\sigma > 0, \beta > 0). \tag{4-33}$$

为简便计,先设 $\sigma = 1$,此时由式(4-33),可得

$$a_{j1} = \exp(-(j-1)\beta) \qquad (j = 1,2,\cdots). \tag{4-34}$$

再由数学归纳法,可得

$$a_{jl} = \exp(-(j-l)\beta)\sqrt{1-\exp(-2\beta)} \qquad (l = 2,3,\cdots,j). \tag{4-35}$$

将上式代入式(4-32),即有 $x_1 = y_1$,

$$x_2 = \exp(-\beta)y_1 + \sqrt{1-\exp(-2\beta)}\,y_2 = \exp(-\beta)x_1 + \sqrt{1-\exp(-2\beta)}\,y_2,$$

$$\begin{aligned} x_3 &= \exp(-\beta)(\exp(-\beta)y_1 + \sqrt{1-\exp(-2\beta)}\,y_2) + \sqrt{1-\exp(-2\beta)}\,y_3 \\ &= \exp(-\beta)x_2 + \sqrt{1-\exp(-2\beta)}\,y_3. \end{aligned}$$

一般地,有

$$x_j = \exp(-\beta)x_{j-1} + \sqrt{1-\exp(-2\beta)}\,y_j \qquad (j = 2,3,\cdots,n). \tag{4-36}$$

对于一般的 $\sigma > 0$,易得

$$\begin{cases} x_1 = \sigma y_1, \\ x_j = \exp(-\beta)x_{j-1} + \sigma\sqrt{1-\exp(-2\beta)}\,y_j \qquad (j = 2,3,\cdots,n). \end{cases} \tag{4-37}$$

因此,只要生成标准正态随机数 $y_1, y_2, \cdots, y_n$,即可由上式得到 $x_1, x_2, \cdots, x_n$. 上式是递推公式,在计算机上计算很方便.

4.2.3 给定一维分布和相关系数时的随机向量的抽样

在许多实际问题中,要给出随机向量 X 的联合密度函数是比较困难的. 但通过实际观测资料,常常可以给出分量 X_i 的密度函数值 $f_i(x)$,以及各个分量之间的相关系数 $\rho_{ij}(i,j = 1,\cdots,n)$ 的估计值. 这时,如果 X 是正态分布,由式(4-27)知,它的联合密度函数是唯一确定的. 在其他情况下,常不存在这种唯一性,即可以从许多不同的联合密度中抽样,使其具有给定的边缘分布密度 $f_i(x)$ 和协方差 μ_{ij}. 现在的问题是如何由这许多不同的联合密度中选取一种,其相应的抽样方法简便可行,并利用它给出随机向量 X 的抽样序列.

由于一维分布的确定仍是根据实际资料所作的统计推断,所以在确定一维分布时就应该考虑随机向量抽样简便易行的要求. 下面给出 n 维对数正态随机向量的抽样方法.

设随机向量 X 各分量 X_i 服从对数正态分布:

$$f_i(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_i(x_i - a_i)}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(x_i - a_i) + b_i}{\sigma_i}\right)^2\right) \qquad (x_i \geqslant a_i), \tag{4-38}$$

其中参数 a_i, b_i, σ_i 以及随机变量 X_i, X_j 间的相关系数 $\rho_{ij}(i,j = 1,2,\cdots,n)$ 都是已知的. 由上式易得

$$Y_i = \frac{\ln(X_i - a_i) + b_i}{\sigma_i} \tag{4-39}$$

为标准正态分布,即 Y_i 的密度函数为

$$g_i(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right).$$

由于 Y_i 服从正态 $N(0,1)$ 分布,所以 Y_i, Y_j 间的协方差 λ_{ij} 等于其相关系数 r_{ij},即

$$\lambda_{ij} = E(Y_iY_j) = r_{ij} \qquad (i,j = 1,2,\cdots,n). \tag{4-40}$$

由式(4-39),有

$$X_i = a_i + \exp(\sigma_iY_i - b_i). \tag{4-41}$$

经积分计算,可得

$$E(X_i) = a_i + \exp\left(\frac{\sigma_i^2}{2} - b_i\right),$$

$$\mathrm{var}(X_i) = \exp(\sigma_i^2 - 2b_i)(\exp(\sigma_i^2) - 1),$$

$$E(X_iX_j) = a_ia_j + a_j\exp\left(\frac{\sigma_i^2}{2} - b_i\right) + a_i\exp\left(\frac{\sigma_j^2}{2} - b_j\right) +$$

$$\exp\left(\frac{\sigma_i^2+\sigma_j^2}{2}+r_{ij}\sigma_i\sigma_j-b_i-b_j\right).$$

根据以上式子,可得到 Y_i, Y_j 间的相关系数 r_{ij} 与 X_i, X_j 间的相关系数间的关系为

$$\rho_{ij}=\frac{\exp(\sigma_i\sigma_j r_{ij})-1}{((\exp(\sigma_i^2)-1)(\exp(\sigma_j^2)-1))^{1/2}}$$

或

$$r_{ij}=\frac{1}{\sigma_i\sigma_j}\ln\left(\sqrt{(e^{\sigma_i^2}-1)(e^{\sigma_j^2}-1)}\rho_{ij}+1\right). \tag{4-42}$$

另外,经推导,还可得到 X_i 的偏态系数

$$C_{SX_i}=\frac{\exp(3\sigma_i^2)-3\exp(\sigma_i^2)+2}{(\exp(\sigma_i^2)-1)^{3/2}}. \tag{4-43}$$

以上诸式,适合于采用极大似然估计法先估计 a_i, b_i, σ_i,然后再计算 $E(X_i)$, σ_{X_i}, C_{SX_i} 的情况.如果要采用先用矩估计法求出 $E(X_i), \sigma_{X_i}, C_{VX_i}$($C_{VX_i}=\frac{\sqrt{D(X_i)}}{E(X_i)}$ 是 X_i 的变异系数),C_{SX_i} 的估计值,然后再推算 a_i, b_i, σ_i 的方法,则可采用如下步骤:

先将 C_{SX_i} 估计值代入下式,

$$\eta_{t_i}=\left(\frac{C_{SX_i}+\sqrt{C_{SX_i}^2+4}}{2}\right)^{1/3}-\left(\frac{-C_{SX_i}+\sqrt{C_{SX_i}^2+4}}{2}\right)^{1/3}; \tag{4-44}$$

求得 η_{t_i} 后,再由

$$a_i=E(X_i)\left(1-\frac{C_{VX_i}}{\eta_{t_i}}\right),\quad \sigma_i=\sqrt{\ln(1+\eta_{t_i}^2)}, \tag{4-45}$$

算得 a_i, σ_i,最后由算得 b_i:

$$b_i=\frac{1}{2}\ln\left[\frac{1+\eta_{t_i}^2}{(E(X_i)-a_i)^2}\right]. \tag{4-46}$$

假定 $\boldsymbol{Y}=(Y_1,Y_2,\cdots,Y_n)^{\mathrm{T}}$ 为 n 元标准化正态随机向量,即假定其联合密度为

$$g(y_1,y_2,\cdots,y_n)=(2\pi)^{-\frac{n}{2}}|\boldsymbol{R}|^{-\frac{1}{2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{Y}\right\},$$

其中 $\boldsymbol{R}=[r_{ij}]$ 为 $\boldsymbol{Y}$ 的相关矩阵,则由式(4-42)求出 r_{ij} 之后,$g(y_1,y_2,\cdots,y_n)$ 便被完全给定.利用前述正态随机向量的抽样方法,即可得 $\boldsymbol{Y}$ 的抽样值 $y_i, i=1,2,\cdots,n$.再由式(4-41),即得出 $\boldsymbol{X}$ 的抽样值 $x_i, i=1,2,\cdots,n$.这相当于假定 $\boldsymbol{X}=(X_1,X_2,\cdots,X_n)^{\mathrm{T}}$ 为 n 维对数正态随机向量.

对于一个特定的分布,通常会有很多抽样方法.一个选取非均匀随机数发生器的一般性建议是:(1) 使用简单而且快速的生成方法;(2) 选用能满足要求的可用的程序;(3) 如果结果看起来有疑问的话,则可检查非均匀随机数发生器中所用的均匀随机数发生器.

5　蒙特卡罗法在抽样和分析中的应用

5.1　用舍选抽样方法估计积分

令 f 是 p 维随机向量 X 的概率密度函数. 设对于某 $c>0$, 有 $f\leqslant c$, 则

$$\begin{aligned}\theta &= \int_{[0,1]^p} g(x)f(x)\mathrm{d}x \\ &= E(g(U)f(U)) = E(g(X)) \\ &\quad (X\sim f(x),\ U\sim \mathscr{U}[0,1]^p).\end{aligned}$$

θ 的两个蒙特卡罗估计如下.

算法 1

(1) 抽取 $U_1,U_2,\cdots,U_{N_0}\overset{\text{i.i.d.}}{\sim}\mathscr{U}[0,1]^p$.

(2) 用 $\hat{\theta}_1=\dfrac{1}{N_0}\sum\limits_{i=1}^{N_0}g(U_i)f(U_i)\equiv\sum\limits_{i=1}^{N_0}g(U_i)w_{1i}$ 估计 θ,

其中 $w_{1i}=f(U_i)/N_0$.

算法 2

(1) 利用舍选抽样方法抽取 $X_1,X_2,\cdots,X_{N_0}\overset{\text{i.i.d.}}{\sim}f$, 使得对于每个 i, 有

{a. 独立地产生 $Y\sim\mathscr{U}[0,1]^p$ 和 $U\sim\mathscr{U}[0,1]$;

b. 若 $Z=cU\leqslant f(Y)$, 则令 $X_i=Y$, 否则, 转回 a. 步}.

(2) 用

$$\hat{\theta}_2=\frac{1}{N_0}\sum_{i=1}^{N_0}g(X_i)=\sum_{i=1}^{N_0}g(Y_i)\frac{I_{\{cU_i\leqslant f(U_i)\}}}{\sum\limits_{j=1}^{N_0}I_{\{cU_j\leqslant f(U_j)\}}}\equiv\sum_{i=1}^{N_0}g(U_i)w_{2i}$$

估计 θ, 其中 I 是示性函数; $w_{2i}\approx I_{\{cU_i\leqslant f(U_i)\}}/(N_0/c)$. 注意

$$E(w_{2i}\mid U_i)\approx\frac{c}{N_0}E(I_{\{cU_i\leqslant f(U_i)\}})=\frac{c}{N_0}\frac{f(U_i)}{c}=w_{1i}.$$

由拉奥 - 布列克威尔(Rao-Blackwell)不等式知, $\mathrm{var}(E(X\mid Y))\leqslant\mathrm{var}(X)$, 则有 $\mathrm{var}(w_{1i})\leqslant\mathrm{var}(w_{2i})$. 因此, 一般来说, 推荐算法 1.

5.2　随 机 抽 样

1. 有放回随机抽样

从一个有 N 个东西的盒子中有放回地随机抽样(抽 n 次)常用于自助(bootstrap)重抽样方法. 它假定每次都是独立地和等可能地, 即以 $1/N$ 的概率, 从 N 个东西中抽取一个样本, 记得到的样本为 $O_1,O_2,\cdots,O_n$. 这种抽样方法的简单算

法为：

$$
\begin{aligned}
&\text{对于 } i = 1,2,\cdots,n,\\
&\{\text{产生 } U_i \sim \mathscr{U}[0,1];\\
&\text{若 } j = [NU_i] + 1, \text{则选 } O_j\}.
\end{aligned}
$$

2. 不放回随机抽样

从一个有 N 个东西的盒子中**不放回地随机抽样**(抽 n 次)常用于抽样调查.它假定任一特定输出(亦即抽出的 n 个东西 O_j 都不相同)的概率为 $1\Big/\binom{N}{n}$.这种抽样的一个序贯方法是不断地不放回抽样,直到得到 n 个不同的整数为止：

$$
\begin{aligned}
&\text{对 } i = 1,2,\cdots,n,\\
&\{(1)\ \text{产生 } U_i \sim \mathscr{U}[0,1],\\
&\text{令 } j = [NU_i] + 1,\\
&\text{直到 } j \in \{O_{j(1)},\cdots,O_{j(i-1)}\};\\
&(2)\ \text{选 } O_j\}.
\end{aligned}
$$

5.3 置换方法

置换 n 个物品等价于将这些物品随机进行组合,使得出现每种组合结果是等可能的,即出现的概率为 $1/n!$.摩西(Moses)和奥克福德(Oakford)(1963)的置换方法是很容易操作的,其置换算法如下：

$$
\begin{aligned}
&j = n,\\
&\text{当}(j > 1)\text{时,运行如下步骤:}\\
&\{\text{产生 } U \sim \mathscr{U}[0,1],\\
&\text{令 } k = [jU] + 1;\\
&\text{将 } O_k \text{ 与 } O_j \text{ 交换};\\
&j \leftarrow j - 1\}.
\end{aligned}
$$

6 随机过程的模拟

除一维和多维随机变量之外,经常还会遇到随机过程 $X(t)$ 在离散时刻 $t_1 < t_2 < \cdots$ 上取值的随机序列 $X(t_1),X(t_2),\cdots$ 显然,一个给定的随机过程,经截断和数字离散化处理后,可得一组随机变量 $X(t_1),X(t_2),\cdots,X(t_N)$.它可以看做是一个 N 维随机向量,因而可以利用随机向量的抽样方法,给出 $(X(t_1),X(t_2),\cdots,X(t_N))^{\mathrm{T}}$ 的模拟值.但是在许多实际问题中,由于 N 取值很大,利用这种方法模拟随机过程困难很大.另外,在研究随机过程的许多场合中,并不要求涉及联合分布的问题.这时就有可能给出问题的比较简单的解答.

下面介绍一些随机过程统计模拟的方法.

6.1　马尔可夫链的模拟

马尔可夫(A.A.Markov)链简称为马氏链.以下假设马氏链都是齐次的,其转移概率不随时间而变.

1.时间离散的马氏链

设 $X_0, X_1, \cdots$ 为马氏链,其状态空间为 $E = (0,1,2,\cdots)$,一步转移概率矩阵为

$$P = [p_{ij}] \qquad (i,j = 0,1,2,\cdots), \tag{6-1}$$

且其初始分布为

$$Q = (q_0, q_1, q_2, \cdots). \tag{6-2}$$

根据直接抽样的原理,可以按下面的方式,规定随机变量序列 $X_0, X_1, X_2, \cdots$ 的取值.

(1) 取随机数 u_0,找一数 k_0,使

$$\sum_{i=0}^{k_0-1} p_i < u_0 \leqslant \sum_{i=0}^{k_0} p_i.$$

定义 $X_0 = k_0$,并规定 $\sum_{i=0}^{-1} p_i = 0$.

(2) 取随机数 u_1,找一数 k_1,使 $\sum_{i=0}^{k_1-1} p_{k_0 i} < u_1 \leqslant \sum_{i=0}^{k_1} p_{k_0 i}$.

定义 $X_1 = k_1$,并规定 $\sum_{i=0}^{-1} p_{k_0 i} = 0$.

(3) 设 $X_j = k_j$ 已经确定,再取随机数 u_{j+1},找一数 k_{j+1},使

$$\sum_{i=0}^{k_{j+1}-1} p_{k_j i} < u_{j+1} \leqslant \sum_{i=0}^{k_{j+1}} p_{k_j i}.$$

定义 $X_{j+1} = k_{j+1}$,并规定 $\sum_{i=0}^{-1} p_{k_j i} = 0$.

易知,这样生成的 $\{X_j\}$ 就是具有给定性质式(6-1)与式(6-2)的马氏链.

2.时间参数连续的马氏链

有一类重要的马氏过程的运动法则由两种随机因素决定,一是状态间的跳跃,像时间离散的马氏链一样,马氏过程能由一个随机跳跃矩阵 $P = [p_{ij}]$ $(i,j = 0,1,2,\cdots)$ 来描述,不过这时总有 $p_{ii} = 0$;二是停留时间的分布为指数分布,即

$$P_i(T \leqslant t) = 1 - \exp(-\lambda_i t) \quad (t \geqslant 0). \tag{6-3}$$

上式的含义是:在某时刻位于状态 i 的条件下,停留在 i 的时间不超过 t 的条件概率,其中 $\lambda_i \geqslant 0, i = 0,1,\cdots$ 皆为已知常数,初始分布同式(6-2).

对上述过程的模拟程序如下.

(1) 如上述1.的(1),定义 $X_0 = k_0$;再生成参数为 λ_{k0} 的指数分布的随机数 T_1.

(2) 如上述1.的(2),定义 $X_1 = k_1$;再生成参数为 λ_{k1} 的指数分布的随机数 T_2.

(3) 如上述 1. 的(3), 定义 $X_{j+1} = k_{j+1}$; 再生成参数为 $\lambda_{k_{j+1}}$ 的指数分布随机数 T_{j+2}.

(4) 令 $T_0 = 0$. 对于 $t \in [\sum_{i=0}^{l} T_i, \sum_{i=0}^{l+1} T_i]$, 定义 $X_t = k_l$.

这样生成的 $\{X_t, t \geqslant 0\}$ 就是满足给定条件的连续时间参数的马氏链.

上述模拟程序的直观含义是: 质点自 k_0 出发, 停留一段时间 T_1, 转移到 k_1, 又停留一段时间 T_2, 再转移到 k_2…

6.2 弱平稳过程的模拟

要求模拟一个具有已给相关函数 $B(t)(t \in \mathbf{R}^1)$ 的弱平稳过程 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^1\}$, 且 $E(X_t) = 0$. 在计算机上只能生成过程在有限多个等距离的点 $t_1, t_2, \cdots, t_n$ 上的值, 其中 $t_{i+1} - t_i = h$ 是常数.

假定过程为滑动平均模型, 即

$$X(t_k) = \sum_{i=1}^{n} c_i \varepsilon_{k-1+i}, \tag{6-4}$$

其中 $\{\varepsilon_i\}$ 为满足条件

$$E(\varepsilon_i) = 0, \quad \mathrm{var}(\varepsilon_i) = B(0), \quad E(\varepsilon_i \varepsilon_j) = 0 \quad (i \neq j) \tag{6-5}$$

的任意随机变量; $\{c_i\}$ 为未知参数. 因为

$$E(X(t_k)X(t_1)) = E((\sum_{i=1}^{n} c_i \varepsilon_{k-1+i})(\sum_{i}^{n} c_i \varepsilon_i))$$

$$= B(0) \sum_{i=1}^{n-k+1} c_i c_{k-1+i},$$

而 $B(t) = E(X(s+t)X(s))$ 已知, 故可从 n 个方程

$$B(t_k - t_1) = E(X(t_k)X(t_1)) = B(0)(c_1 c_k + c_2 c_{k+1} + \cdots + c_{n-k+1} c_n)$$
$$(k = 1, 2, \cdots, n) \tag{6-6}$$

中解出 $c_1, c_2, \cdots, c_n$. 可以证明, 式(6-4) 所表示的 $\{X(t_i)\}$ 是弱平稳的.

在抽样产生 $\{\varepsilon_i\}$ 的过程中, $\{\varepsilon_i\}$ 的分布可取为满足式(6-5) 的任意分布. 例如, 可取为相互独立的 $(-h, h)$ 上的均匀分布. 此时, $E(\varepsilon_i) = 0, E(\varepsilon_i \varepsilon_j) = 0, i \neq j$, $\mathrm{var}(\varepsilon_i) = h^2/3 = B(0)$, 因此, 只需取 $h = \sqrt{3B(0)}$. 当然, 也可以取为相互独立的 $N(0, \sqrt{B(0)})$ 的正态分布.

6.3 平稳正态马氏过程的模拟

设实值平稳正态过程 $\{X(t), t \geqslant 0\}$ 的相关函数为

$$B(t) = \sigma^2 \exp(-\beta |t|) \qquad (\sigma > 0, \beta > 0). \tag{6-7}$$

称 $X(t)$ 是正态过程, 是指对于任意 n 个 $t_1 < t_2 < \cdots < t_n$, $X(t_1), X(t_2), \cdots, X(t_n)$

的联合分布是 n 维正态分布的.不失一般性地设 $E(X(t)) = 0$.于是,这个 n 维正态分布由协方差矩阵 $V = [v_{ij}]$ 唯一决定,其中 $v_{ij} = E(X(t_i)X(t_j))$.

由式(6-7)知,

$$v_{ij} = B(t_i - t_j) = \sigma^2 \exp(-\beta \mid t_i - t_j \mid). \tag{6-8}$$

由随机过程理论可知,$B(t)$ 所对应的谱密度为

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\mathrm{i}\omega t) B(t)\mathrm{d}t = \frac{\sigma^2}{\pi}\frac{\beta}{\omega^2 + \beta^2}. \tag{6-9}$$

可以证明,这个过程不仅是平稳的,而且是马氏过程.

模拟 $\{X(t), t \geqslant 0\}$ 时,实际上只能模拟有限个随机变量 $X_i = X(i \cdot \Delta t), i = 1, 2, \cdots, n$,其中步长 $\Delta t > 0$ 是一常数.由于过程的正态性,故可利用式(4-6)进行抽样,并由第4章的例7直接得到(将那里的 $\beta \cdot 1$ 换为 $\beta \cdot \Delta t$):

$$\begin{cases} X_1 = \sigma y_1, \\ X_i = \exp(-\beta \Delta t) X_{i-1} + \sigma\sqrt{1 - \exp(-2\beta\Delta t)}\, Y_i \quad (1 < i \leqslant n), \end{cases} \tag{6-10}$$

其中 $\{Y_i, i = 1, 2, \cdots, n\}$ 是相互独立的服从 $N(0,1)$ 分布的随机变量.

6.4 一阶马氏过程的模拟

设 $\rho_X(k)$ 为随机变量 X 的 k 阶序列相关系数.如果 $\rho_X(k)$ 可以近似地表示为 $(\rho_X(1))^k$,则随机变量 X 的时间序列可以用一阶平稳马氏过程来近似.当二阶及二阶以上的序列相关对所研究的问题没有太大意义(或影响很小)时,也可采用这一模型.

设一阶(平稳)马氏过程为

$$X_{i+1} = \mu_X + \rho_X(1)(X_i - \mu_X) + \varepsilon_{i+1}, \tag{6-11}$$

其中 X_i 是过程在时刻 i 处的值;μ_X 是 X 的均值;$\rho_X(1)$ 是 X 的一阶序列相关系数;ε_i 是满足 $E(\varepsilon) = 0, \sigma^2(\varepsilon) = \sigma_\varepsilon^2$,并与 X_{i-1} 无关的随机变量.此模型表明,X 在某一时刻的取值,只与其前一时刻 X 的取值有关.设 σ_X^2 为 X 的方差,由式(6-11),得

$$X_{i+1} - \mu_X = \rho_X(1)(X_i - \mu_X) + \varepsilon_{i+1}. \tag{6-12}$$

对上式两端平方后取期望,因 ε_{i+1} 与 X_i 无关,故可得 σ_X^2 与 σ_ε^2 的关系如下:

$$\sigma_\varepsilon^2 = \sigma_X^2(1 - \rho_X^2(1)). \tag{6-13}$$

设 X 服从正态 $N(\mu_X, \sigma_X^2)$ 分布,则由式(6-11)知,ε 的分布为 $N(0, \sigma_\varepsilon^2)$.因此,可先由 $N(0, \sigma_\varepsilon^2)$ 分布中抽样 ε_{i+1},然后将 ε_{i+1} 代入式(6-11),计算得到 X_{i+1} 的值.设以 γ 表示标准化正态随机变量,则 $\gamma\sigma_X\sqrt{1 - \rho_X(1)}$ 是分布为 $N(0, \sigma_\varepsilon^2)$ 的随机变量.于是,要抽样产生服从 $N(\mu_X, \sigma_X^2)$ 分布、一阶序列相关系数为 $\rho_X(1)$、且符合一阶马氏模型的过程 X_i,可用如下抽样公式:

$$X_{i+1} = \mu_X + \rho_X(1)(X_i - \mu_X) + \gamma_{i+1}\sigma_X^2\sqrt{1 - \rho_X^2(1)}. \tag{6-14}$$

用上式生成 X_{i+1},需要估计 $\mu_X, \sigma_X, \rho_X(1)$. X_i 的初始值 X_1 可从 $N(\mu_X, \sigma_X^2)$ 中抽得.如要消除初值的影响,可将这样得到的序列的前几项去掉,例如将开始的 50 ~

100 项去掉.

若正态分布拟合不好,则可以假设其服从其他分布,如假设 X 服从对数正态分布等,然后再进行计算.

6.5 具有周期性的一阶马氏过程的模拟

上述的一阶马氏模型式(6-11)又称为一阶自回归模型.这一过程就其前三阶矩来说都是平稳的,即均值、方差、偏态系数以及序列相关系数均与时间无关.然而有许多过程具有明显的周期性(为具体起见,以下均假定周期为一年),上述模型不能反映这一重要特性.为此可将上述模型概型化,以研究过程的周期性.周期性变化不仅影响到平均值,而且影响到所有各阶矩及一阶序列相关系数.

下面对一阶平稳马氏过程概型化.记变量的第一个下标 i 表示年份,$i = 1,2,\cdots,n$,表示有 n 年资料.第二个下标 j 表示年内的季节,$j = 1,2,\cdots,m$,表示考虑 m 个季节,例如,当以年为单位时,$m = 12$.以 μ_{X_j} 表示 X 在第 j 季节的数学期望,可以用第 j 季节的多年平均值 $\overline{X}_j$ 作为估计值,即

$$\overline{X}_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{ij}, \tag{6-15}$$

其中 x_{ij} 表示第 i 年第 j 季节的观测值.类似地,第 j 季节方差 $\sigma_{X_j}^2$ 可用 $S_{X_j}^2$ 来估计:

$$S_{X_j}^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_{ij} - \overline{x}_j)^2. \tag{6-16}$$

第 j 季节的偏态系数 ν_{X_j} 可用 C_{SX_j} 估计,即

$$C_{SX_j} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{ij} - \overline{x}_j)^2}{(n-3)S_{X_j}^2}. \tag{6-17}$$

第 j 季节的 X_j 与其后季节的 X_{j+1} 之间的序列相关系数 $\rho_{X_j}(1)$ 可用 $r_{X_j}(1)$ 来估计,即

$$r_{X_j}(1) = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_{ij}x_{i,j+1} - n\overline{x}_j\overline{x}_{j+1}}{(n-1)S_{X_j}S_{X,j+1}}. \tag{6-18}$$

在上式中,当 $j = m$ 时,$\overline{x}_{m+1} = \overline{x}_1$,$S_{X,m+1} = S_{X_1}$,$x_{i,m+1} = x_{i+1,1}$.

这样经过概型化后,具有周期性的正态分布一阶马氏模型为

$$X_{i,j+1} = \mu_{X,j+1} + \frac{\sigma_{X,j+1}}{\sigma_{X_j}}\rho_{X_j}(1)(x_{ij} - \mu_{X_j}) + \varepsilon_{i,j+1}\sigma_{X,j+1}\sqrt{1-\rho_{X_j}^2(1)}, \tag{6-19}$$

其中 $\varepsilon_{i,j+1}$ 是服从 $N(0,1)$ 的随机变量.上式在具体应用时,其总体参数总是由相应的样本估计量来代替,且当 $j = m$ 时,$x_{i,m+1} = x_{i+1,1}$.

实际应用中,正态分布有其局限性,因此,在必要时可采用对数正态分布.

除以上讨论的几种模型外,有时还会用到高阶自回归模型,多重马尔可夫模型等.在结构的随机震动分析中,对平稳随机过程的模拟,常使用随机过程的谱来表示生成过程.

7　降低方差技术

若问题的误差为 ϵ，置信水平为 $1-\alpha$，则由蒙特卡罗法的误差公式，有

$$\frac{c_\alpha \sigma}{\sqrt{N}} \leqslant \varepsilon,$$

其中 c_α 由置信水平唯一确定；σ 为均方差. 由上式推得

$$N \geqslant \left(\frac{c_\alpha}{\epsilon}\right)^2 \sigma^2. \tag{7-1}$$

上式表明，在误差和置信水平给定的情况下，蒙特卡罗法的抽样数 N 完全取决于方差 σ^2 的大小，σ^2 值越小，则相应的抽样数越少. 因此，降低方差是提高蒙特卡罗法效率的最重要途径之一. 降低方差的方法有多种，下面介绍主要的常用的方法.

7.1　条　件　法

令 X, Y 为随机变量或随机向量，由概率论知识，有

$$E(E(X \mid Y)) = E(X),$$

$$\operatorname{var}(X) = \operatorname{var}(E(X \mid Y)) + E(\operatorname{var}(X \mid Y)) \geqslant \operatorname{var}(E(X \mid Y)).$$

设 $h(Y) = E(g(X) \mid Y)$，则要估计

$$\theta = E(g(X)) = E(E(g(X) \mid Y)) = E(h(Y)),$$

可用条件估计量

$$\hat{\theta}_1 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} h(Y_i)$$

来估计. 此方法就称为**条件法**(conditioning). 其方差小于(因而优于) 如下朴素估计的方差:

$$\hat{\theta}_0 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g(X_i).$$

这里，$X_1, X_2, \cdots, X_N$ 是独立同分布的，与 X 同分布；$Y_1, Y_2, \cdots, Y_N$ 也是独立同分布的，与 Y 同分布.

例 1　设 $X = Z/Y$，其中 $Z \sim \mathcal{N}(0,1)$，$Y > 0$ 与 Z 独立. 例如，若 $Y \sim \chi_\nu^2/\nu$，则 $X \sim t_\nu$. 考虑

$$\theta = P(\overline{X}_n > c) = E(I_{\{\overline{X}_n > c\}}),$$

其中 I 是示性函数；$\overline{X}_n = \sum X_i/n$. θ 的朴素估计为 $\hat{\theta}_0 = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} I_{\{\overline{X}_n^{(i)} > c\}}}{n}$，$\overline{X}_n^{(i)}$ 为 $\overline{X}_n$ 的第 i 个"版本". 对于条件估计量，在给定 $\boldsymbol{Y} = (Y_1, Y_2, \cdots, Y_n)^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{y}$ 下，有

$$\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{Z_i}{y_i} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2(\boldsymbol{y})),$$

其中
$$\sigma(y)=\sqrt{\frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{y_i^2}}.$$

因此，记 Φ 为标准正态分布函数，有

$$\begin{aligned}h(Y) &= E[I_{\{\overline{X}_n>c\}}\mid Y]\\ &= P\left\{\frac{\overline{X}_n}{\sigma(Y)}>\frac{c}{\sigma(Y)}\mid Y\right\}\\ &= 1-\Phi\left(\frac{c}{\sigma(Y)}\right)=1-\Phi\left(\frac{nc}{\sqrt{\sum\frac{1}{Y_i^2}}}\right).\end{aligned}$$

因而条件估计为

$$\hat{\theta}_1=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}h(Y^{(i)}),$$

其中$Y^{(i)}$ 是 Y 的第 i 个独立的“版本”. 该估计量容易计算，而且不需要对 X 抽样.

上述结果的一个很重要启发是，为了降低蒙特卡罗法的方差，要找一个随机变量或随机向量 Y，使得 Y 容易产生，且 $h(Y)$ 容易计算，然后在估计 θ 时，用条件估计 $\hat{\theta}_1$ 代替朴素估计.

7.2　重要度抽样法

假设有参数的估计

$$\theta=E_f(g(x))=\int g(x)f(x)\mathrm{d}x,$$

其中$f(x)$是 X 的概率密度函数；E_f 表示在关于 f 下求期望，则对于另一个概率分布函数 $q(x)$，有

$$\theta=\int g(x)f(x)\mathrm{d}x=\int\frac{g(x)f(x)}{q(x)}q(x)\mathrm{d}x=E_q\left(\frac{g(x)f(x)}{q(x)}\right).$$

重要度抽样法就是：从 $q(x)$ 而非 $f(x)$ 中抽样，且用下式估计 θ：

$$\hat{\theta}_2=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{g(X_i)f(X_i)}{q(X_i)},$$

其中 $X_1,X_2,\cdots,X_N$ 是来自 $q(x)$ 的独立同分布的样本. 显然，$\hat{\theta}_2$ 的方差为 $\mathrm{var}(g(X)f(X)/q(X))/N$，如果选取 q 使得 $g(X)f(X)/q(X)$ 近似为常数的话，这一方差可以很小. 因此，在重要度抽样中，要寻找这样的 q，使得 $q\approx cgf$ 对于某常数成立，且 q 容易抽样.

例 2　(柯西分布)　这是一个人为构造的例子，其精确解：

$$\theta=P(X>2)=\int I_{\{x>2\}}\frac{1}{\pi}\frac{1}{1+x^2}\mathrm{d}x.$$

为使 $q(x)\propto I_{\{x>2\}}\frac{1}{1+x^2}$，取

$$q(x) = I_{\{x>2\}} \frac{2}{x^2},$$

其中2是正则常数,使得 q 为概率密度函数.因为 q 的概率分布函数为 $Q(x) = 1 - 2/x$,来自 q 的随机数 X 可取为 $X = Q^{-1}(U) = 2/(1-U)$ 或简单取为 $X = 2/U$,其中 $U \sim \mathscr{U}(0,1)$.直接可以看出

$$\frac{g(x)f(x)}{q(x)} = I_{\{x>2\}} \frac{1}{2\pi} \frac{x^2}{1+x^2} \in I_{\{x>2\}} \frac{1}{2\pi}\left[\frac{4}{5},1\right],$$

它非常接近为常数.事实上,

$$\text{var}[\hat{\theta}_2] = \frac{9.6\times10^5}{N} \ll \frac{0.1258}{N} = \text{var}[\hat{\theta}_0],$$

其中$\hat{\theta}_0$是朴素估计.

7.3　控制变量法

控制变量法的基本思想是对部分模拟计算采用解析法或数值法来计算.

假设有 $h(x)$,使得 $\mu = E_f(h(X))$ 已知,或可用分析方法或数值方法求出.由于

$$\theta = E_f(g(X)) = E_f(g(X) - h(X)) + \mu,$$

故可用下式估计 θ:

$$\hat{\theta}_3 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(g(X_i) - h(X_i)) + \mu,$$

其中$X_1, X_2, \cdots, X_N$是来自f的独立同分布的样本.若 $g - h \approx c$,c是某常数,则估计量 $\hat{\theta}_3$ 的方差可以很小.$h(x)$ 称为控制变量.

例3　设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 独立同分布,来自 f,$g(X)$ 是 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的样本中位数,要求估计 $\theta = E_f(g(\boldsymbol{X}))$,其中 $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \cdots, X_n)^{\mathrm{T}}$.$\theta$ 的精确结果可以是非常复杂的.选取 $h(\boldsymbol{X}) = \bar{X}_n$ 为样本均值,其期望是 μ.通常,μ 比样本中位数的均值更容易精确计算,那么,

$$\hat{\theta}_3 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(g(\boldsymbol{X}^{(i)}) - \bar{X}_n^{(i)}) + \mu.$$

其中$(\boldsymbol{X}^{(i)}, \bar{X}_n^{(i)})$ 是$(\boldsymbol{X}, \bar{X}_n)$ 的第 i 个独立的版本.通常有

$$\text{var}(g(X_i) - \bar{X}_n^{(i)}) \ll \text{var}(g(X_i)),$$

特别是当 f 是一个单峰的密度函数时.因此,在这个例子中,$\hat{\theta}_3$ 常常是比朴素估计更好的估计量.

上面所提出的三种估计都有多元的情形和其他的推广.例如,在自适应控制变量方法中,h 可用某些基函数的适当线性组合来估计(作为 g 的逼近).详细内容和方法这里从略.

7.4　降低方差的其他技术

除上述降低方差的技术外,降低方差的技术还有对偶变数技术、系统抽样技术、分层抽样技术和分裂与轮盘赌技术等.

1. 对偶变数抽样技术

设随机变量或向量 X 服从分布 $f(x)$,随机变量 X' 同样服从分布 $f(x')$,所不同的只是由后者所确定的随机变量 $g(X')$ 同前者所确定的随机变量 $g(X)$ 是负相关(对偶相关)的.显然,

$$g_{AV}=\frac{1}{2}(g(X)+g(X'))\tag{7-2}$$

的数学期望同样为 $G=\int g(x)f(x)\mathrm{d}x$,它的方差为

$$\frac{1+\rho}{2}\mathrm{var}(g(X)),$$

其中 ρ 为随机变量 $g(X)$ 和 $g(X')$ 的相关系数.当相关系数 $\rho=-1$ 时,作为**对偶变数**抽样技术所确定的随机变量 g_{AV},其方差将为零.

以上结果提供了降低蒙特卡罗法的方差的另一个重要途径:除原确定的随机变量外,可寻找另一个具有相同数学期望的随机变量(也可以是多个),使得它们之间尽量是负相关的,然后用这两个(或多个)随机变量的线性组合(当这些随机变量具有相同方差时,组合方法和式(7-2)类似,这是具有等加权的组合方法.当这些随机变量的方差不同时,最好的组合方法是采用不等加权的组合方法,加权应该同其相应的方差成反比)作为蒙特卡罗法最终所确定的随机变量.例如,令 $Z=g(U)$,其中 g 是一单调函数,U 是(0,1)上均匀随机变量,则易证 Z 的一个对偶变量为 $g(1-U)$.这一结果非常有用——对于任意具有分布函数 F 的连续随机变量 Z,Z 与 $F^{-1}(U)$ 具有相同的分布.由于逆分布函数 F^{-1} 是单调的,因此,$F^{-1}(U)$ 的一个对偶变量为 $F^{-1}(1-U)$.

2. 系统抽样技术

系统抽样技术的一般方法是,对问题中所出现的某些随机变量不进行随机抽样,而是按相应分布所确定的比例进行抽样.

3. 分层抽样技术

分层抽样技术是系统抽样技术的进一步改进,它对问题中所出现的某些随机变量不进行随机抽样,而是进行分层,尽量使原问题所确定的随机变量(其数学期望是要计算的量)在各层中相对平稳,各层间的抽样数按相应分布所确定的比例进行.

4. 分裂与轮盘赌抽样技术

全面考虑蒙特卡罗法的效率时,可使用降低方差的分裂与轮盘赌抽样技术.

考虑积分问题

$$G=\iint g(x,y)f(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y,$$

其中$g(x,y)$为连续函数；$f(x,y)$为X和Y的密度函数．将x（或y）的积分区域分为两部分：重要区域S和非重要区域R，那么

$$g_{SR}=\frac{1}{N(x)}\sum_{i=1}^{N(x)}g(x,y^{(i)})I(x\in S)+\frac{g(x,y)}{P(x)}I(x\in R,u\leqslant P(x))$$

的数学期望同样为G，其中$N(x)$为取整函数；X的密度函数为$f(x)$；$y^{(i)}$表示由$f(y\mid x)$中抽样确定的第i个样本值；Y服从分布$F(y\mid x)$；I是示性函数；$P(x)$表示概率．

计算g_{SR}的费用最小的情况是，分裂个数

$$N(x)=\sqrt{\frac{C}{C_1(x)}}\left(\frac{\mathrm{var}_f(g(x,y)\mid f(y\mid x))}{\mathrm{var}_f(g(x,y))}\right)^{1/2},$$

轮盘赌获胜概率

$$P(x)=\sqrt{\frac{C}{C_1(x)}}\left(\frac{\int g^2(x,y)f(y\mid x)\mathrm{d}y}{\mathrm{var}_f(g(x,y))}\right)^{1/2},$$

其中 $$C=C_0+\int_S C_1(x)N(x)f(x)\mathrm{d}x+\int_R C_1(x)P(x)f(x)\mathrm{d}x;$$

C_0是由分布$f(x)$中抽样产生x的费用；$C_1(x)$是对于确定的x，由分布$f(y\mid x)$中抽样产生y和计算$g(x,y)$的费用．

分裂和轮盘赌抽样技术的一般做法是，对于抽样确定的x，当它属于重要区域S时，则对相应的y进行多抽样；当它属于非重要区域R时，只有在轮盘赌获胜时才对相应的y进行抽样．

8 蒙特卡罗法的部分应用

蒙特卡罗法的应用十分广泛，这里只对其中几个问题作简单介绍．

8.1 在回归分析方面的应用

1. 回归方程的模拟检验

在多元回归分析计算中，对所得到的回归方程要进行预报效果可靠性和稳定性的统计检验．检验的一般做法是把所有的观测数据分为两部分，一部分（多数观测资料）用于建立回归方程，一部分（少量观测资料）用于检验回归方程．但当观测数据的样本量不多时，应用这种检验方法是有困难的．为了克服这种困难，可以利用模拟方法来检验回归方程预报的有效性．

设有n组资料

$$(x_{i1},x_{i2},\cdots,x_{im},y_i)\quad(i=1,2,\cdots,n),\tag{8-1}$$

其中y为预报量或因变量；$x_{\cdot j}$为与y有关的一些自变量，或称预报因子．假设y与诸$x_{\cdot j}$满足线性回归方程：

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{m} \beta_j x_{ij} + \varepsilon_i, \tag{8-2}$$

其中ε_i相互独立，服从正态 $N(0,\sigma^2)$ 分布.利用逐步回归方法，在众因子中经过筛选得到上式 β_j 的估计值 b_j，并给出复相关系数 R 的估计值

$$R^* = \left(1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}\right)^{1/2}, \tag{8-3}$$

其中$\hat{y}_i$表示由回归方程给出的对y_i的估计值；$\bar{y} = \sum_{i=1}^{n} y_i / n$是预报量$y$的平均值；$y_i$是 y 的观测值.

为了检验用回归模型式(8-2) 预报和随机预报之间的差异是否显著，可用本篇第 4 章所述的任意一种方法生成 n 个因变量y_i，$i = 1,2,\cdots,n$，即生成 $N(\bar{y}, S_y^2)$ 分布的正态随机数，其中 $S_y^2 = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2/(n-1)$.用这样生成的 y_i代替式(8-1)中的 y_i，而保持诸 x_{ij} 不变，进行多元回归计算得出生成因变量 y 的回归方程，并求出相应的复相关系数 R值.多次重复这一程序，即可得到在 y与诸x_j无关的条件下 y与诸x_j的复相关系数R的经验分布.利用这一经验分布，即可对式(8-3) 所得 R^* 值进行检验：若对于给定的显著水平 α，

$$P(R > R^*) > \alpha \tag{8-4}$$

成立，则利用式(8-2) 所得回归预报的效果与随机预报的效果差异并不显著，故拒绝接受回归方程式(8-2)；反之，则可接受.

2. 利用回归方程进行内插外推

设有设计变量 Y，通过逐步回归分析，建立起 Y 与参变量 X_1, X_2, X_3 的回归方程：

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \varepsilon. \tag{8-5}$$

其中ε为随机误差项.根据 Y 与X_1, X_2, X_3的 n个观测资料，由上式可得ε的序列$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n$.对这一序列进行统计分析，即可得出 ε 的统计特征(通常 ε 可看成抽自 $N(0,\sigma_\varepsilon^2)$ 的独立随机序列).然后，根据 ε 的统计特性，对 X_1, X_2, X_3 都有观测值，而 Y值缺失的数据产生ε的抽样值.最后利用式(8-5) 即可用内插法算出 Y的缺失值.这种做法比在式(8-5) 中不考虑 ε 的简单做法显然更符合实际情况(在统计平均意义上).众所周知，不考虑 ε 的简单内插，会使 Y 的计算方差偏小，而用上述方法则可改善这一缺陷.当 σ_ε^2 较大，即回归方程的复相关系数较低时，此种做法尤为必要.

8.2　在核临界安全计算中的应用

在任何一个含有裂变物质的核系统中，其主要现象是中子的增殖和死亡.就整

个核系统而言,由于有出现增殖多于死亡而发生事故的可能,因此,一定要考虑核系统是否安全的问题,这就是所谓的核临界安全问题.描述核系统是否安全的方法很多,其中最常见的一种是用有效增殖因子 K_{eff} 来描述的方法. K_{eff} 的定义是:在核系统的中子分布处于相对平稳情况下, K_{eff} 是由裂变产生的一个中子,在同一位置,同样用裂变所产生的下一代中子的平均数.很明显,当 $K_{eff}=1$ 时,核系统的中子增殖数与死亡数相等,是临界安全的;当 $K_{eff}<1$ 时,核系统是安全的;而在其他情况下核系统是不安全的.

记 x 表示中子的位置,一般为三维空间的变量; $S(x)\mathrm{d}x$ 表示核系统的中子分布处于相对平稳情况下,由于裂变引起的在点 x 附近 $\mathrm{d}x$ 内发射的中子平均数; $K(x'\to x)\mathrm{d}x$ 表示在点 x' 发生裂变反应而发射的一个中子,由裂变引起的在点 x 附近 $\mathrm{d}x$ 内发射的中子平均数.于是,根据 K_{eff} 的定义,有核临界安全问题的基本方程为

$$K_{eff}S(x)=\int S(x')K(x'\to x)\mathrm{d}x. \tag{8-6}$$

就是说,计算 K_{eff} 的问题实际上是计算求解齐次积分方程式(8-6)的最大特征值问题.

蒙特卡罗法计算 K_{eff} 的一个最基本的方法是裂变矩阵方法.将包含裂变物质的全体 V 进行分区: $V_1,V_2,\cdots,V_J$,则齐次积分方程式(8-6)可以进一步表示成如下形式:

$$K_{eff}\int_{V_j}S(x)\mathrm{d}x=\sum_{k=1}^{J}\int_{V_j}\int_{V_k}S(x')K(x'\to x)\mathrm{d}x'\mathrm{d}x, \tag{8-7}$$

$j=1,2,\cdots,J$.引入记号

$$K_{jk}=\frac{\displaystyle\int_{V_j}\int_{V_k}S(x')K(x'\to x)\mathrm{d}x'\mathrm{d}x}{\displaystyle\int_{V_k}S(x')\mathrm{d}x'},$$

于是,如果 $S(x')$ 为齐次积分方程式(8-6)的最大特征值 K_{eff} 所对应的特征函数,那么根据方程式(8-7),齐次线性方程组

$$K_{eff}\begin{bmatrix}S_1\\S_2\\\vdots\\S_J\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}K_{11}&K_{12}&\cdots&K_{1J}\\K_{21}&K_{22}&\cdots&K_{2J}\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\K_{J1}&K_{J2}&\cdots&K_{JJ}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}S_1\\S_2\\\vdots\\S_J\end{bmatrix}, \tag{8-8}$$

与方程式(8-6)具有相同的最大特征值.

裂变矩阵法就是通过计算齐次线性方程组式(8-8)的最大特征值来给出核系统的有效增殖因子 K_{eff} 的.具体地说就是,用蒙特卡罗法计算给出矩阵元素 K_{jk},然后用一般方法计算给出齐次线性方程组式(8-8)的最大特征值.

为了计算矩阵元素 K_{jk},需要计算

$$K_{jk}=\frac{\int_{V_j}\int_{V_k}S(x')K(x'\to x)\mathrm{d}x'\mathrm{d}x}{\int_{V_k}S(x')\mathrm{d}x'}$$

的积分.然而,由于其中的 $S(x')$ 是未知的,这个积分实际上是不能直接计算的.为了解决这一问题,一种办法是,假设小区域 $V_1,V_2,\cdots,V_J$ 已经分得足够小,使得在每个小区域上,$S(x)$ 可以被视为是均匀的,或者可以被视为是某个其他的已知分布.此时,对于任意的 $k,k=1,2,\cdots,J$,定义在小区域 V_k 上的密度函数 $S(x)\Big/\int_{V_k}S(x')\mathrm{d}x'$ 为已知,那么用蒙特卡罗法计算 K_{jk} 便可行了.

此外还有描述核系统状态的其他方法,这里就不再叙述了.

8.3　在统计物理计算中的应用

蒙特卡罗法早在20世纪50年代初就已经被应用到统计物理的研究中.近年来,由于计算机技术的飞速发展,蒙特卡罗法在统计物理中的应用已达到了实用阶段,解决了不少统计物理中过去难以解决的计算问题.

蒙特卡罗法在统计物理中的应用时,其中遇到的最重要问题之一是计算如下形式的平均观测量:

$$A=\frac{\int A(x)\pi(x)\mathrm{d}x}{\int\pi(x)\mathrm{d}x},\tag{8-9}$$

其中x 表示相空间中的点;$\pi(x)$ 表示物理系统的分布;$A(x)$ 表示某个观测量.

按照物理假设,系统分布 $\pi(x)$ 只满足非负条件,但不满足规一条件,因此,为了用一般蒙特卡罗法计算积分$\int A(x)\pi(x)\mathrm{d}x$,需要将 $\pi(x)$ 进行规一化,即用 $\pi(x)\Big/\int\pi(x)\mathrm{d}x$作为密度函数.可是,积分$\int\pi(x)\mathrm{d}x$ 也是未知的,同样需要计算,而且同积分$\int A(x)\pi(x)\mathrm{d}x$ 的计算是同等困难的,用蒙特卡罗法计算 A 也有困难.

为了解决上述困难,即解决由非规一分布 $\pi(x)$ 中实现抽样的问题,针对系统分布 $\pi(x)$ 的特点,即对于任意 x,虽然 $\pi(x)$ 已知,但未规一化,米特罗波利斯(N. C. Metropolis) 给出了一种非常巧妙的方法,即著名的米特罗波利斯抽样方法.

米特罗波利斯抽样方法的一般原理是,选取一个转移函数 $P(x',x)$,使满足如下条件:

$$P(x',x)\geqslant 0,\quad \int P(x',x)\mathrm{d}x=1;$$

$$\pi(x)=\int\pi(x')P(x',x)\mathrm{d}x';$$

$$\lim_{m\to\infty}\pi_m(x)=c\pi(x),$$

其中 $\pi_m(x)=\left(\int\pi_0(x_0)\mathrm{d}x_0\right)\left(\prod_{i=0}^{m-2}\int P(x_i,x_{i+1})\mathrm{d}x_{i+1}\right)P(x_{m-1},x)$；

$\pi_0(x)$ 为 $\pi(x)$ 的任意初始近似，满足条件

$$\pi_0(x)\geqslant 0, c=\frac{\int\pi_0(x)\mathrm{d}x}{\int\pi(x)\mathrm{d}x}.$$

对于满足上述条件的转移函数 $P(x',x)$，由分布 $\pi(x)$ 中抽样的米特罗波利斯方法是：由 $\pi_0(x)$ 中抽样产生 x_0；对于确定的 m，由 $P(x_m,x_{m+1})$ 中抽样产生 x_{m+1}，由此产生的 $\{x_m\}_{m=0}^{\infty}$ 即为 $\pi(x)$ 的渐近样本. 在实际应用中，只可能用有限个，因此，实际上是用 $\{x_m\}_{m=0}^{N}$ 或 $\{x_m\}_{m=M}^{M+N}$ 近似看做为 $\pi(x)$ 的样本，其中 M 为足够大的正整数. 作为蒙特卡罗法对于由式(8-9)所确定的 A 的近似估计便是

$$\overline{A}=\frac{1}{N+1}\sum_{m=M}^{M+N}A(x_m).$$

参考文献

1 Birnbaum. JASA, 1952(47): 425 ~ 441.

2 Johnstone I M, Velleman P F. The resistant line and related regression methods. JASA, 1985(80): 1041 ~ 1059.

3 Knuth D E. Seminumerical algorithms. 3rd Edition, Vol. 2 of The art of computer programming. New York: Addision-Wesley, 1998.

4 Marsaglia G. Random numbers fall mainly in planes. Pro Natl Acad Sci, 1968(61): 25 ~ 28.

5 Park S K, Miller K W. Communications of the ACM, 1988(31): 1192 ~ 1201.

6 Press W H et. al. Numerical recipes: The art of scientific computing. 2nd Edition. London: Cambridge University Press, 1996.

7 Ripley B D. Stochastic Simulation. Wiley, 1987.

8 Smirnov. AMS, 1948(19): 277 ~ 281.

9 Tausworthe R C. Random number generated by linear recurrence modulo two. Math Comp 1965(19): 201 ~ 209.

10 从树铮，徐映波. 蒙特卡罗法. 见：现代工程数学手册编委会. 现代工程数学手册. 第Ⅳ卷. 武汉：华中工学院出版社，1987.

·随机数学卷·

第11篇

现代统计计算方法

编　者　刘　军　孙嘉阳　邵　军
翻译者　于　丹
审校者　石　坚

目　录

引　　言

现代统计计算方法的研究对象是统计中的计算问题.

自费希尔(R.A.Fisher)在20世纪初创立了现代统计理论以来,统计计算就成为统计科学的一个重要的研究方向.这里所谓的现代统计计算方法是指近20年来随着计算机技术的发展和普及而发展起来的统计计算方法.利用它们不仅可以解决一些复杂的统计计算问题,而且随着对它们的深入研究又进一步提出了一些有意义的理论问题.统计理论的本质在于对现实世界中那些未知事物的探索,而统计计算方法在这里恰好起到了一个桥梁的作用.随着人们认识的不断深入,统计计算方法的应用范围早已超出了统计科学本身,如今现代统计方法已在生物、化学、物理、材料科学、金融以及计算机科学中获得了广泛的应用.因此,可以说,现代统计计算方法是认识未知世界不可缺少的有力工具.

本篇由四部分内容组成,它们是EM算法、马氏链蒙特卡罗(MCMC)方法、投影寻踪(PP)方法和自助法.可以说,这四个统计计算方法概括了现代统计计算的主要内容.

1　EM算法

1.1　概　　述

丹姆斯特(Dempster),拉尔德(Laird)和鲁宾(Rubin)于1977年首次给出了"期望-极大化"算法的最一般形式,并将其命名为EM算法.到目前为止,EM算法也许是最流行的统计计算方法.孟晓犁① 和佩得罗(Pedlow)1992年在近300种期刊中统计出的与EM算法有关的文章超过了1000篇,而其中85%的文章是用于其他领域,而非用于统计.1994年,斯狄格勒(Stigler)在一篇评论文章中将丹姆斯特等人的文章列为最高引用率的6篇文章之一.EM算法广泛流行的两个理由是它的简洁性和稳定性.同时还有一个更本质的原因,那就是通过EM算法可以实现在统计观点下的聚焦.好的统计思想具有组织和展开创造性思维的能力,进一步,它能够被用来设计更加有效的算法.

EM算法是在下述例子所展示的思想激发下产生出来的.

假设观测值(x_i, y_i), $i = 1, \cdots, N$,来自一个二元正态分布$N(0, \boldsymbol{\Sigma})$.易知,$\boldsymbol{\Sigma}$的

① 作者在与孟晓犁教授的多次交谈以及对他最近文章的研究中获益匪浅,在此谨致感谢.

极大似然估计(MLE) 是样本协方差阵

$$S = \frac{1}{N}\begin{bmatrix} \sum_i x_i^2 & \sum_i x_i y_i \\ \sum_i x_i y_i & \sum_i y_i^2 \end{bmatrix}.$$

如果观测中的某些分量随机地丢失了,那么这时要对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 进行估计将不再是一件简单的事情. 表 1-1 所示的即是不完全二元正态观测数据,如何求 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的估计值呢?

表 1-1

-0.05	0.25	-1.80	-1.4	0.02	-0.80	0.29	-2.20	*	*	*	*
-0.71	-0.25	-1.50	-0.56	*	*	*	*	0.21	-0.26	-0.15	-1.00

* 表示丢失的数值.

如果对丢失的数据没有其他辅助信息,则一个直观的做法是:(1) 给定 $\boldsymbol{\Sigma}$ 一个当前的估计,输入丢失数据的期望值;(2) 在补充丢失数据后重新估计 $\boldsymbol{\Sigma}$. 通过在(1) 和(2) 两个步骤之间的不断地迭代,即可在丢失数据情况下解决估计 $\boldsymbol{\Sigma}$ 这样一个复杂的计算问题. 这种利用期望值补充丢失数据和利用补充丢失数据得到的完全样本来更新参数估计,并在这两个步骤之间不断进行迭代的算法,正是 EM 算法解决这种例子的思想. 不过,一般地,常用对数似然期望值作为每一次迭代的输入,而不是用具体的观测数据期望值作为输入.

另一个迭代算法的例子可以在 1926 年麦克德里克(Mckendrik) 的一篇著名文章中找到. 他首先考虑了一个最简单的传染病传播过程,他用极限泊松分布来描述遭到 x 次袭击的单个家庭的数量. 作为一个应用,他分析了一个印度村庄流行性霍乱传染的数据,数据见表 1-2 中的前两行. 其中 x 代表被感染家庭中患者的个数, n_x 代表患者人数为 x 的家庭的个数.

表 1-2

x	0	1	2	3	4	≥5	总和
n_x	168	32	16	6	1	0	223
简单泊松拟合	151.64	58.48	11.28	1.45	0.04	0.01	223
麦克德里克拟合	36.47	33.92	15.78	4.89	1.14	0.25	92.45
极大似然拟合	33.46	32.53	15.81	5.12	1.25	0.29	88.46

对表 1-2 所示的数据集,直接拟合泊松模型意味着用样本均值

$$\hat{\lambda} = \frac{\sum_x x n_x}{\sum_x n_x} = 0.368$$

来估计泊松分布的均值 λ,然后再利用参数 $\hat{\lambda}$ 的估计结果,计算出 n_x 的拟合结果,如表 1-2 中的第 3 行所示. 显然利用简单的泊松模型对数据进行拟合效果并不好.

关于上面的拟合结果，麦克德里克的解释是，这种病毒大概生存在水中，在这个村子中有许多水井，也许其中有一个感染了病毒.因此，只有一部分村民喝了感染病毒的井中的水，而其他村民喝的是没有感染病毒的井中的水.这解释了为什么在泊松拟合中 $x=0$ 所对应的 n_x 值异常地大的原因.基于这个理由，麦克德里克采用了截断的泊松分布来拟合数据.

假定 n_0 表示接触病毒但没有被感染的家庭数目，$\tilde{n}_0$ 代表没有接触到病毒的家庭数目，显然 $n_0 \leqslant 168$，$n_0+\tilde{n}_0=168$.麦克德里克用矩阵方法解决这样一个丢失数据问题.他利用关系

$$E\sum_i X_i^2 - E\sum_i X_i = n\lambda^2$$

和

$$(E\sum_i X_i)^2 = n^2\lambda^2$$

来估计 n_0.麦克德里克的拟合结果见表1-2中的第4行.

后来艾尔文(Irwin,1963)改进了麦克德里克的方法，这种方法恰好就是后来的EM算法.他的算法是：首先基于一个 n_0 的一个合理的猜测去估计 λ，再利用 λ 估计值修正 n_0.该方法的拟合结果见表1-2中的第5行.后面将给出用EM算法解决该问题的详细步骤.

1.2　EM算法及其理论

1. EM算法

EM算法是一种在不完全数据情况下计算极大似然估计或者后验分布的迭代算法.它也可以作为计算边缘分布的工具.

这种算法取名为EM算法是为了强调迭代算法的两个步骤，即E步和M步.一般地讲，E步是expectation step的缩写，表示在给定观测数据和前一次迭代所得到的参数估计的情况下计算完全数据对应的对数似然函数的条件期望.M步是maximization step的缩写，表示用极大化对数似然函数以确定参数的值，并用于下步的迭代.该算法要求在E步和M步之间不断迭代直至收敛为止.

EM算法的数学描述如下：记 $L(\theta \mid Y_{obs})=\log f(y_{obs}\mid\theta)$ 是将要在 $\theta\in\Theta$ 上进行极大化的对数似然函数，其中 Y_{obs} 是观测数据.假定有一种扩充 Y_{obs} 的方法来得到 $Y=[Y_{obs},Y_{mis}]$，非观测部分 Y_{mis} 为丢失数据，则称 Y 为完全数据(更精确地应该称之为扩充后的数据).这时给定 Y 下的对数似然函数可以表示成 $L(\theta\mid Y)=\log f(Y\mid\theta)$.从一个初始的猜测值 $\theta^{(0)}\in\Theta$ 开始，通过EM算法的E步和M步，将获得迭代结果构成的序列 $\{\theta^{(t)},t=0,1,2,\cdots\}$.

E步：在假定 $\theta=\theta^{(t)}$ 下计算 $L(\theta\mid Y)$ 的条件期望 $Q(\theta\mid\theta^{(t)})$，

$$Q(\theta\mid\theta^{(t)})=\int L(\theta\mid Y)f(Y_{mis}\mid Y_{obs},\theta=\theta^{(t)})\,\mathrm{d}Y_{mis}. \tag{1-1}$$

M步：通过极大化 $Q(\theta\mid\theta^{(t)})$ 求出 $\theta^{(t+1)}$，即确定 $\theta^{(t+1)}$，使得

$$Q(\theta^{(t+1)} \mid \theta^{(t)}) \geqslant Q(\theta \mid \theta^{(t)}) \qquad (\forall \theta \in \Theta). \tag{1-2}$$

最后,在E步和M步之间不断迭代直至收敛,即可得到结果.

2. EM算法的性质

1° 简洁性 EM算法的简洁性依赖于对数似然函数 $L(\theta \mid Y) = \log f(Y_{obs}, Y_{mis} \mid \theta)$ 的函数形式.在实际问题中往往可以构造出 Y_{mis},使得 $f(Y_{obs}, Y_{mis} \mid \theta)$ 具有指数族形式,这时 $L(\theta \mid Y)$ 作为 θ 的函数很容易求极值.当 $f(Y \mid \theta)$ 具有指数族形式时,$L(\theta \mid Y)$ 是完全数据情形下充分统计量 $S(Y)$ 的线性函数,这时E步将简化成计算 $S(Y)$ 的期望 $S^{(t)}$,

$$S^{(t)} = \int S(Y_{obs}, Y_{mis}) f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \theta = \theta^{(t)}) \mathrm{d}Y_{mis}.$$

上式只涉及条件期望的常规处理.M步后变成极大化 $Q(\theta \mid \theta^{(t)}) = L(\theta \mid S^{(t)})$,它与完全数据情形下极大化对数似然函数同样地简单.

事实上,正是在人们可以充分利用完全数据情形下极大似然估计的简洁性才使得EM算法得以广泛流行.另外,E步中的丢失数据的输入(更严格地讲,应是完全数据情况下的似然)有着非常直观的统计背景,这一点为发展改进算法提供了一个非常方便的舞台.输入的概念在各种基于蒙特卡罗的计算技术的发展过程中也扮演了关键角色,详见马氏链蒙特卡罗方法一章.

2° 收敛的稳定性 从参数空间的任意一个内点出发,EM迭代序列 $\{\theta^{(t)}, t = 0,1,2,\cdots\}$ 总是沿着对数似然函数增长的方向达到最大值的.更精确地讲,下面不等式总是成立:

$$L(\theta^{(t+1)} \mid Y_{obs}) \geqslant L(\theta^{(t)} \mid Y_{obs}) \qquad (\forall t = 0,1,\cdots).$$

这一性质对于任何广义EM算法也同样成立.丹姆斯特等人把满足下面较弱条件的任意算法定义为广义EM算法:

$$Q(\theta^{(t+1)} \mid \theta^{(t)}) \geqslant Q(\theta^{(t)} \mid \theta^{(t)}) \qquad (\forall t). \tag{1-3}$$

事实上,容易看到

$$L(\theta \mid Y_{obs}, Y_{mis}) = L(\theta \mid Y_{obs}) + \log f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \theta). \tag{1-4}$$

对式(1-4)两边关于 $f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \theta)$ 取期望,可得

$$Q(\theta \mid \theta^{(t)}) = L(\theta \mid Y_{obs}) + \int (\log f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \theta)) \times f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \theta = \theta^{(t)}) \mathrm{d}Y_{mis}. \tag{1-5}$$

利用詹森(Jensen)不等式,可得

$$\int (\log f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \theta)) f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \theta^{(t)}) \mathrm{d}Y_{mis} \leqslant \int (\log f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \theta^{(t)})) f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \theta^{(t)}) \mathrm{d}Y_{mis},$$

对于任意 θ 成立.因此,如果 $\theta^{(t+1)}$ 满足式(1-3),则有

$$L(\theta^{(t+1)} \mid Y_{obs}) \geqslant L(\theta^{(t)} \mid Y_{obs}).$$

以上证明了任何广义EM算法的**单调收敛性**.

另外,在许多实例计算中发现,对数似然函数的"爬山步长" $L(\theta^{(t+1)} \mid Y_{obs}) -$

$L(\theta^{(t)} \mid Y_{obs})$ 在迭代的最初几步(例如 $t \leqslant 5$)特别地大,尤其是在初始值远离收敛点的时候.这一性质说明,EM算法的迭代区域常常会很快地转移到似然的一个局部极值的领域,但是收敛到局部极值的速度还是非常慢的.在理论上可以证明,EM算法收敛到似然函数的一个鞍点.如果选取充分分散的几个不同的初值进行迭代,这一问题是可以得到解决的.在实际使用EM算法时,也常常推荐取不同初值这一做法,因为这样做可以确定似然函数,或者更一般地确定一个**后验密度**是否具有多个峰.后者对于统计推断来说是非常重要的问题,因为当后验密度多峰的时候,只从一个初值出发常常会导致错误的推断.

简洁性、收敛的稳定性和直接检测多峰的可能性,使得EM算法成为对那些以计算为工具的统计学家非常有吸引力的算法.

1.3 EM算法在计算费希尔观测信息中的应用

在使用EM算法或它的推广版本ECM时,有几个补充方法和算法可用于计算极值点 $\boldsymbol{\theta}^*$ 处的费希尔观测信息

$$I_{obs} = -\left.\frac{\partial^2 \log f(Y_{obs} \mid \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^{\mathrm{T}}}\right|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*},$$

以及极大似然估计的**渐近方差-协方差**.刘易斯(Louis,1982)利用完全数据下的费希尔观测信息及在完全数据情形下得分函数的乘积,给出了 I_{obs} 的代数表达式.当观测数据可以表示成独立同分布样本时,梅里捷森(Meilijson,1989)给出一个近似方法.贝克(Baker,1992)利用完全数据和不完全数据间的联结矩阵,给出了将EM算法用于**属性数据**情况下计算 I_{obs} 的方法.孟晓犁和鲁宾(1991)给出了一个补充EM(**SEM**)算法,该算法利用

$$V_{obs} = I_{obs}^{-1} = I_{com}^{-1}[I - DM^{EM}]^{-1} = V_{com}[I - DM^{EM}]^{-1}, \tag{1-6}$$

来计算渐近方差 I_{obs}^{-1},其中

$$DM^{EM} = I_{mis} I_{com}^{-1} \tag{1-7}$$

表示EM算法的收敛速度.更精确地讲,DM^{EM} 是EM映射的**雅可比矩阵**(Jacobian matrix)(该映射通过EM迭代:$\theta^{(t+1)} = M^{EM}(\theta^{(t)})$ 来定义),I_{mis} 和 I_{com} 分别表示丢失数据和完全数据**信息矩阵**,

$$I_{mis} = \int -\frac{\partial^2 \log f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^{\mathrm{T}}} f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \boldsymbol{\theta}) \mathrm{d} Y_{mis} \mid_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*},$$

$$I_{com} = \int -\frac{\partial^2 \log f(Y \mid \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^{\mathrm{T}}} f(Y_{mis} \mid Y_{obs}, \boldsymbol{\theta}) \mathrm{d} Y_{mis} \mid_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*}.$$

由此,利用式(1-7)及信息恒等式 $I_{obs} = I_{com} - I_{mis}$ 可得式(1-6).

SEM的好处主要基于下面的事实:计算收敛速度矩阵 DM^{EM} 仅需要运行E步和M步的计算程序,只要完全数据下的费希尔观测信息是没有观测到完全数据充分统计量的线性函数,就可直接计算出 I_{com}(或 $V_{com} = I_{com}^{-1}$),这种情形恰好是EM算法最有效的时候.

EM 算法收敛速度的另一个有趣的用途是估计混合模型分量的个数.

1.4 EM 算法在麦克德里克问题处理中的应用

为了说明 EM 算法的早期形式,下面分析由麦克德里克首先处理过的表 1-2 所示的数据.在这个例子中,用 n_{mis} 表示没有被传染的家庭的个数,

$$n_{\text{obs}} = \sum_{x>0} n_x = 223 - 168$$

表示至少有一个成员感染病毒的家庭的个数,N_{mis} 表示零类家庭的个数.这时完全数据下的对数似然函数为

$$L(\lambda \mid n_{\text{obs}}, N_{\text{mis}}) = \sum_{x\geqslant 1} n_x(-\log(x!) + x\log(\lambda)) - \lambda(N_{\text{mis}} + n_{\text{mis}}).$$

为完成 E 步需计算 n_0^{t+1},

$$n_0^{t+1} = E(N_{\text{mis}} \mid n_{\text{obs}}, \lambda = \lambda^{(t)}) = \frac{\exp(-\lambda(t))}{1 - \exp(-\lambda(t))} n_{\text{obs}}.$$

因为在给定 λ 和 n_{obs} 的条件下,N_{mis} 服从负二项分布,故

$$Q(\lambda \mid \lambda^{(t)}) = \sum_{x>0} n_x(-\log(x!) + x\log(\lambda)) - \lambda(n_0^{(t+1)} + n_{\text{obs}}).$$

在 M 步中,通过极大化上面的 Q 函数可得到下面的迭代公式:

$$\lambda^{(t+1)} = \frac{\sum_{x>0} x n_x}{n_{\text{obs}}}(1 - \exp(-\lambda(t))) \qquad (t = 0,1,2,\cdots).$$

容易看到,上面的迭代结果收敛到唯一的极大似然估计.EM 算法的单调性保证了 $\lambda^{(t+1)} \geqslant \lambda^{(t)}$.

另外一个处理麦克德里克数据的方法是采用**混合分布** $p\delta_0 + (1-p)(\lambda)$ 来处理,其中 $p(\lambda)$ 为泊松分布.作为一个有价值的练习,读者可以利用 EM 算法基于混合分布的观点来解决这一问题.

为计算极大似然估计 λ^* 的方差,需要计算完全数据下的信息 I_{com} 和丢失信息 I_{mis}.这里

$$I_{\text{com}} = \frac{1}{\lambda^2}\sum_x x n_x \Big|_{\lambda=\lambda^*},$$

$$I_{\text{obs}} = \frac{n_{\text{obs}} e^{-\lambda}}{(1 - e^{-\lambda})^2}\Big|_{\lambda=\lambda^*}.$$

这时,对于 EM 算法,$DM^{\text{EM}} = 0.593$,极大似然估计的方差

$$V_{\text{obs}} = I_{\text{obs}}^{-1}(1 - DM^{\text{EM}})^{-1} = 0.027.$$

1.5 EM 算法的推广

自丹姆斯特等人的研究结果发表以来,推广和改进 EM 算法就成为一个非常活跃的研究方向,已有的推广该结果的动机有两个方面 —— 统计和计算.

这里的统计是就技术和目的两个方面来讲的,指推广工作主要基于统计上的考虑,而且遵循 EM 算法的基本特征,即简洁性和稳定性;同时,这种推广的中心目的是增强 EM 算法的简洁性,例如对于那些常规计算收敛很慢的场合,改进其收敛速度.

计算一方面是指解决 EM 算法在实际使用中遇到的在完全数据下对数似然函数的期望难于求极值的问题.针对这一问题,孟晓犁和鲁宾认为,将一个多元极值问题拆开成几个容易计算的低维的条件极值问题来处理,通常可以解决这一问题,且计算条件极值的步骤与极大化似然函数是相同的.更精确地讲,如果 θ 能够被分成(θ_1,θ_2),就能在固定 $\theta_2 = \theta_2^{(t)}$ 下关于 θ_1 进行极大化 $Q(\theta \mid \theta^{(t)})$,然后在固定 $\theta_1 = \theta_1^{(t+1)}$ 下关于 θ_2 进行极大化.

孟晓犁和鲁宾举了三个例子来说明条件极大化是有好处的,因为这样做就不必为了消除"雀巢"迭代而对 M 步计算进行补充.

在他们的例子中有一个是关于对数线性模型丢失数据的,他们所用的条件极大似然(CM)步骤比简单地对参数向量分割要复杂得多.他们证明了这样一种"期望 - 条件极大化"(ECM)算法在某些情况下不仅提高了 EM 算法的简洁性,而且仍然保持收敛性(任何 ECM 序列都具有单调收敛性).

从算法的迭代步数来说,一般情况下 ECM 算法比 EM 算法明显地收敛得慢些,但也有例外的时候.最近,刘军和鲁宾发现,在运行的 ECM 算法中,对于部分参数 θ_1,极大化真实的(条件)对数似然函数 $L(\theta \mid Y_{obs})$ 和关于参数 θ_1 的极大化完全数据对数似然函数的期望 $Q(\theta \mid \theta^{(t)})$ 都需要相似的单变量最优化算法.因此他们建议在运行 CM 步时可以用极大化真实的(条件)对数似然函数,也可以用极大化完全数据对数似然函数的期望.这种混合算法可称为 ECME 算法.刘军和鲁宾在理论上和经验上证明了它的稳定性和快速收敛性.

为什么 ECME 算法在不损失稳定性的前提下可以显著地降低 ECM 算法的迭代步数呢?这需要明确丹姆斯特等人所揭示的一个简单关系:在一般的正则条件(如式(1-7)所示)下,EM 算法的收敛速度等于丢失信息所占的比例.从直观上看,方程式(1-7)表明,对数据所做的扩充越少,EM 算法收敛得越快.因此,如果在运行 EM 算法时有两种扩充数据的方法,那么就应该采用对数据扩充少的那种方法.事实上,在数据扩充和吉布斯(J.W.Gibbs)采样上也是如此.费斯勒(Fesslerand)和荷偌(Hero)1994年提供了一种更一般的空间交替广义 EM 算法(他们将其缩写为 SAGE),并将之应用于图像重构问题,该问题由谢珀(Shepp)和瓦迪(Vardi)1982 年用 EM 算法进行过处理.孟晓犁和冯·迪克(1997)对"交替期望 / 条件极大化(AECM)"算法的框架做了如下描述:该算法在不同的 CM 步骤中可以采用不同的数据扩充手段,如此使得在不损失原始 EM 算法的简洁性或稳定性的条件下构造快速算法变得更加灵活.

计算的另一方面是指将 EM 算法与其他数值计算加速技术结合,以期获得比原始 EM 算法收敛得更快的算法.它们包括将 EM 算法与埃特肯(Aitken,1982)加速技术组合、与各种牛顿型加速技术组合,以及与共轭梯度加速技术组合(Lange,1995).这些加速技术的一个主要缺点是不再能保证似然的单调收敛性.除此之外,

它们还有一些额外要求，如需要仔细地观察计算过程是否收敛，而且也要求方法的使用者有很深的数值计算和统计知识．在运行E步过程中使用蒙特卡罗模拟或数值积分计算时也需要对计算过程的收敛细心地观察，因为这些来自E步的随机模拟和数值计算产生的误差可能破坏EM算法的稳定性．

EM算法的应用范围远远超出了丹姆斯特等人所发展起来的EM算法的一般理论．例如，除了包含埃弗朗(Efron)1967年提出的自相合估计形式在非参数估计中的应用之外，它还包括了著名的卡普兰-梅尔(Kaplan-Meier,1958)估计，以及分组数据、删失数据、截断数据情形下的坦博(Turnbull,1974)算法．但是，除参数族情形之外，EM还缺乏满意的一般理论，这种内在结构意义上的，而非数学形式上的一般推广的理论是否存在也还不十分清楚．

2 马氏链蒙特卡罗方法

2.1 概 述

计算机模拟技术对于解决许多科学领域中的计算问题是不可缺少的重要工具．它有着广泛的应用领域，如生物学、化学、计算机科学、财政金融、工程技术、材料科学、物理学和统计学等．在众多的模拟方法中，蒙特卡罗方法，尤其是**马氏链蒙特卡罗(MCMC)方法**为统计建模提供了广阔的前景，因而引起统计学家们的广泛重视．

所有蒙特卡罗方法的一个基本步骤是产生服从某个目标概率分布函数 π 的伪随机样本．人们感兴趣的变量 x 通常在 $\mathbf{R}^k$ 中取值，但有时也会在一个拓扑空间上取值．在大多数应用中，从一个人们感兴趣的分布 π 中产生独立样本是不可行的．通常情况是，要么产生的样本是相关的，要么产生样本的分布异于所要求的 π，或者二者同时发生．冯·诺伊曼(J. Von Neumann)采样、重要度采样以及采样重要度重抽样，都是从一个与人们感兴趣的分布 π 有所区别，但又比较接近的**试验分布** $p(x)$ 中产生相关或独立的样本．**米特罗波利斯-哈斯汀(Metropolis-Hastings)算法**是MCMC方法的基本框架，是一种从以 π 为其稳定分布的马氏链中产生相关样本的方法．从这一点来看，MCMC基本上是一种通过展开马氏链来获得相关样本的混合型蒙特卡罗方法．由于实际问题中的统计模型越来越复杂，而MCMC恰好提供了一个使许多复杂的问题得以分析的统一框架．

在丢失数据或者有讨厌参数时，为了对感兴趣的参数进行统计推断或预报，贝叶斯学派和频率学派都有可能需要在一个高维分布上进行积分．这样一个基本的需求使得MCMC方法在统计建模和推断过程中扮演了一个重要的角色．可以看到，在过去的几年里有迹象表明，几乎所有统计研究方向的研究者对MCMC的兴趣有爆炸式的增长．从布鲁克斯(S. Brooks)负责的网址 http://www.stats.bris.ac.uk/MCMC/ 处可以获得有关MCMC的最新的研究文章．

2.2 随机变量的生成

为了产生服从概率分布函数 π 的随机变量,首先需要产生[0,1]区间上的均匀分布随机变量.但是,这样一个看起来很简单的工作在计算机上却是无法实现的.一般所能做到的是生成**伪随机数**.更确切地讲,可以将一种算法定义成一个伪均匀**随机数发生器**,该算法从一个初值 u_0(称之为种子)出发,在区间[0,1]中生成一个序列 $(u_t) = (D^t(u_0))$.对于所有的 n,$(u_1, u_2, \cdots, u_n)$ 应该能够摹仿均匀分布随机变量的一个独立同分布样本 $(V_1, V_2, \cdots, V_n)$ 的行为.目前已有一些非常好的伪随机数发生器,推荐读者参考玛萨格里亚(Masaglia)和扎曼(Zaman)1993 年的研究成果,以及肯斯(Knuth)1981 年的研究成果.下面总假定可以在计算机上生成满意的均匀分布随机变量.这样可以有下面简单的结论.

引理 1 假定 $U \sim U[0,1]$,F 是一个分布函数,则 $X = F^{-1}(U)$ 服从分布 F,其中 $F^{-1}(u) = \inf\{x: F(x) \geqslant u\}$.

上面引理为产生具有已知分布函数的一维随机变量提供了工具.由于许多分布(例如高斯分布)都没有解析表达式,因此,要直接利用上面方法常常是困难的.为了克服这一限制,冯·诺伊曼 1951 年提供了著名的**诺伊曼方法**,该方法同样也适用于多维分布情形.

引理 2 假定 $\pi(x)$ 和 $g(x)$ 是定义在同一个样本空间上的两个分布函数,并且存在 M 使得 $\pi(x) \leqslant Mg(x)$,对一切 x 成立,则由下面算法产生的输出 X 服从分布函数 π:

1° 抽取 $Y \sim g$ 和 $U \sim U[0,1]$.

2° 若 $U \leqslant \pi(Y)/Mg(Y)$,取 $X = Y$;否则回到步骤 1.

对于一个给定的目标分布函数 π,首先可以通过利用一个容易从中产生样本的分布 g,然后确定封套常数 M 来运行上面的诺伊曼算法.显然,诺伊曼算法的效率依赖于常数 M 的大小.

2.3 米特罗波利斯 - 哈斯汀算法

令 $\pi(x) = c\exp\{-h(x)\}$ 是人们感兴趣的目标概率分布函数(可以假定所有的分布函数都可以写成这种形式).米特罗波利斯(1953)等人引进了通过展开一个马氏链来实现从分布 π 中采样这一基本思想.后来,哈斯汀(1970)给出了这种类型算法的更加一般的形式.

2.3.1 米特罗波利斯算法

从任意一个初值 $x^{(0)}$ 开始,**米特罗波利斯算法**通过下面两个步骤进行迭代.

步骤 1 对当前状态施加一个随机扰动,即 $x^{(t)} \to x'$,这里 x' 可以看成是来自一个对称的概率转移函数 $T(x^{(t)}, x')$(即 $T(x, x') = T(x', x)$);计算改变量 $\Delta h = h(x') - h(x^{(t)})$.

步骤 2 抽取一个均匀分布随机数 $u \sim U[0,1]$. 若 $u \leqslant \exp(\Delta h)$, 则令 $x^{(t+1)} = x'$; 否则取 $x^{(t+1)} = x^{(t)}$.

米特罗波利斯方法在过去的 40 年中被广泛应用于统计物理, 且是被统计学界采用, 并得到进一步发展的所有马氏链蒙特卡罗(MCMC)方法的基石.

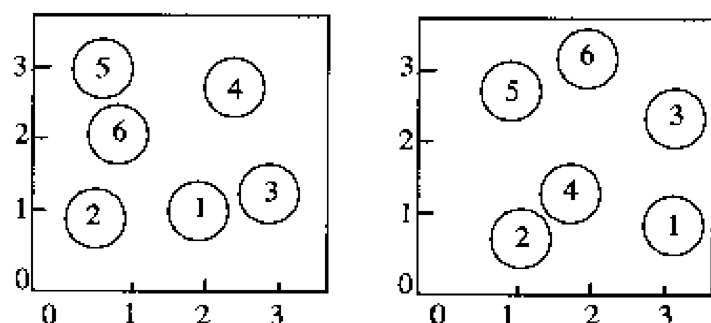


图 2-1

下面以模拟 K 个弹性小球在一个 $[0,A]\times[0,B]$ 盒子中的均匀分布来说明米特罗波利斯算法的应用. 假定这些球有相同的半径 d. 令 $(X,Y)=\{(x_i,y_i), i=1,2,\cdots,K\}$ 表示这些球的位置. 如果所有的球在盒子中并且没有重叠, 目标分布 $\pi(X,Y)$ 等于正常数, 否则为零. 米特罗波利斯算法可按如下方式运行: ① 随机选择一个球, 假定它的位置是 (x_i,y_i); ② 将其移动到一个暂时位置 $(x'_i, y'_i)=(x_i+\delta_1, y+\delta_2)$, 其中 $\delta_j \sim N(0,\sigma_0^2)$; ③ 如果满足约束(即球在盒子中, 且与其他球没有重叠), 接受改变 (x'_i, y'_i), 否则重新击球. 取 $K=6, d=0.8, A=B=3.5$, 所有小球从正则位置开始, 调整 σ_0^2 为 0.5, 这样可获得一个可以接受的速度. 图 2-1 所示为模拟过程的两个快照, 第一个是在第 1000 次迭代时拍下的, 第二个是在 2000 次迭代后拍下的.

2.3.2 哈斯汀对米特罗波利斯算法的推广

哈斯汀对米特罗波利斯算法的推广, 所得到的算法即为米特罗波利斯 - 哈斯汀算法. 对于任意给定的 $\pi(x)$, 米特罗波利斯 - 哈斯汀算法描述了一个马氏链的转移准则, 使得其稳定分布为 $\pi(x)$. 为运行该算法, 首先需要主观地给定一个容易采样的转移函数 $T(x,y)$(通常称之为参照分布). 利用该参照分布可以运行下面的迭代算法.

给定当前状态 $x^{(t)}$.

由参照分布 $T(x^{(t)},y)$ 中抽取 y.

抽取 $U \sim U[0,1]$, 并令

$$x^{(t+1)} = \begin{cases} y & (U \leqslant \rho(x^{(t)},y)), \\ x^{(t)} & (\text{其他}), \end{cases} \tag{2-1}$$

其中, 对于 ρ 函数, 米特罗波利斯等人和哈斯汀建议取

$$\rho(x,y) = \min\left\{1, \frac{\pi(y)T(y,x)}{\pi(x)T(x,y)}\right\};$$

贝克(Baker, 1965)建议取

$$\rho(x,y) = \frac{\pi(y)T(y,x)}{\pi(y)T(y,x)+\pi(x)T(x,y)},$$

查尔斯(Charles)和斯登(Stein)则建议采用一个更一般的 ρ 函数,

$$\rho(x,y)=\frac{\delta(x,y)}{\pi(x)T(x,y)},\tag{2-2}$$

其中 $\delta(x,y)$ 是关于 x 和 y 的任何一个对称函数,并且对于任何 x,y,有 $\rho(x,y)\leqslant 1$.

从前面的几个公式中可以看到,如果按照米特罗波利斯等人最初对 $T(x,y)$ 对称性的要求,那么公式中的 $T(x,y)$ 将被约掉. 比值 $T(y,x)/T(x,y)$ 的直观背景是对链的偏流进行补偿.

如果采用式(2-2) 形式的 ρ 函数,则对于任何 $y\neq x$,根据 M-H 准则,从 x 到 y 的转移概率是

$$\begin{aligned}A(x,y)&=T(x,y)\rho(x,y)\\&=T(x,y)\frac{\delta(x,y)}{\pi(x)T(x,y)}=\pi(x)^{-1}\delta(x,y).\end{aligned}$$

由于 $\delta(x,y)=\delta(y,x)$,对于所有 $x\neq y$,有 $\pi(x)A(x,y)=\pi(y)A(y,x)$. 这意味着由 M-H 准则所诱导出的马氏链是可逆的,并且其不变分布为 π. 但是该马氏链的收敛速度严重依赖于 $T(x,y)$ 和目标分布 π.

对于离散状态空间情形,拜斯昆(Peskun,1973) 证明了在统计有效性准则下,米特罗波利斯等人的 $\rho(x,y)$ 是最优的. 但是在所诱导的马氏链收敛速度意义下最优的 ρ 函数还不清楚.

2.4 吉布斯采样与统计中的数据扩充

吉布斯采样器是一个特殊的 MCMC 方法. 它最显著的特征是通过选择一个保持 π 不变的条件分布序列来构造马氏链. 因此,吉布斯采样器可以有效地将一个高维的模拟问题转化成一系列低维的问题.

2.4.1 吉布斯采样器

假定 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_d)$,在吉布斯采样器中,随机地或固定地选择一个分量,假定为 x_1,然后从条件分布 $\pi(\cdot\mid x_{[-1]})$ 中产生新的样本 x'_1 对 x 进行更新,其中 $x_{[-A]}$ 表示对任何下标的子集 A,定义 $x_{[-A]}=\{x_j\mid j\in A^c\}$.

从算法角度看,吉布斯采样器可描述如下:

(1) 对于随机扫描型吉布斯采样器,假定当前状态为

$$x^{(t)}=(x_1^{(t)},x_2^{(t)},\cdots,x_d^{(t)}),$$

从 $\{1,2,\cdots,d\}$ 中按照给定的概率分布 $(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_d)$ 随机地选择下标 i.

从条件分布 $\pi(\cdot\mid x_{[-i]}^{(t)})$ 中产生 $x_i^{(t+1)}$,并令

$$x_{[-i]}^{(t+1)}=x_{[-i]}^{(t)}.$$

(2) 对于固定扫描型吉布斯采样器,设

$$x^{(t)}=(x_1^{(t)},x_2^{(t)},\cdots,x_d^{(t)}).$$

对于 $i=1,\cdots,d$,从条件分布

$$\pi(x_i\mid x_1^{(t+1)},x_2^{(t+1)},\cdots,x_{i-1}^{(t+1)},x_{i+1}^{(t)},\cdots,x_d^{(t)})$$

中抽取样本 $x_i^{(t+1)}$.

容易验证,每一步条件更新都保持 π 的不变性.假定当前有 $x^{(t)} \sim \pi$,则 $x_{[-i]}^{(t)}$ 服从 π 的边缘分布.这时

$$\pi(x_i^{(t+1)} \mid x_{[-i]}^{(t)}) \times \pi(x_{[-i]}^{(t)}) = \pi(x_i^{(t+1)}, x_{[-i]}^{(t)}),$$

这意味着每一次条件更新后 $(x_{[-i]}^{(t)}, x_i^{(t+1)})$ 的联合分布仍然是 π.

在正则条件下,可以证明吉布斯采样链是几何收敛的,并且其收敛速度依赖于变量之间的相关性.将强相关的变量分组在一起,可以明显地提高吉布斯采样的速度.

吉布斯采样器中的条件更新的潜在用途是它可以被看成是点 x 延着一个方向移动的一种方式,即

$$x_i \to x'_i = x_i + c,$$

其中 c 服从一个适当的分布.

容易证明,如果 c 服从分布 $p(c) = \pi(x_i + c, x_{[-i]})$,则该移动保持 π 不变.这一点是将吉布斯采样推广到变换群上的要点.它对于设计更有效的 MCMC 采样器也是有帮助的,详见 2.7 节中的进一步讨论.

吉布斯采样之所以得到统计界的青睐,源于在每步迭代中条件分布具有广泛的适用性.盖尔范德(Gelfand) 和史密斯(Smith)(1990) 指出,吉布斯采样中所需要的条件,对于许多贝叶斯统计问题及似然计算来说通常是可以满足的.

2.4.2　数据扩充:二分量吉布斯采样器

假定随机变量 x 能够被分成两部分,即 $x = (x_1, x_2)$,当前状态为 $(x_1^{(t)}, x_2^{(t)})$,则二分量吉布斯采样器按下面方式更新:

由条件分布 $\pi_{1|2}(\cdot \mid x_2^{(t)})$ 中抽取 $x_1^{(t+1)}$;

由条件分布 $\pi_{2|1}(\cdot \mid x_1^{(t+1)})$ 中抽取 $x_2^{(t+1)}$.

该采样器是特别有用的.首先,它对应着数据扩充算法,被设计用于处理丢失数据问题的贝叶斯方法.在这样的问题中,其中一个分量,比如说 x_1,常常对应于人们感兴趣的参数;另外一个分量 x_2 对应于丢失数据.这时的吉布斯迭代是在当前丢失数据输入值条件下抽取参数值和在当前参数值条件下输入丢失数据之间交替进行的.这种思想与 EM 算法和重输入密切相关,而且对应用统计学家们来说是有很强的吸引力的.其次,二分量吉布斯采样有一些优秀的理论性质.在很弱的条件下,刘军等人(1994,1995) 证明了该采样器的几何收敛性及单调收敛性.采样器的收敛速度等于两样本之间的最大关系数,它与一个统计概念,丢失数据的贝叶斯方法中的丢失信息比有着密切关系.

可以发现,当平稳性条件

$$\operatorname{cov}(h(x_1^{(0)}), h(x_1^{(1)})) = \operatorname{var}_\pi(E_\pi\{h(x_1) \mid x_2\})$$

对于任意函数 h 成立时,可以推导出 n 步延迟自协方差的表达式:

$$\operatorname{cov}(t(x_1^{(0)}), t(x_1^{(n)})) = \operatorname{var}_\pi(E_\pi(\cdots E_\pi(E_\pi\{t(x_1) \mid x_2\} \mid x_1) \mid \cdots)), \tag{2-3}$$

$$\mathrm{cov}(s(x_2^{(0)}), s(x_2^{(n)})) = \mathrm{var}_\pi(E_\pi(\cdots E_\pi(E_\pi\{s(x_2)\mid x_1\}\mid x_2)\mid\cdots)), \tag{2-4}$$

式(2-3)和式(2-4)的右边是 n 个分别关于 x_1 和 x_2 的条件期望.

2.4.3 实例

埃弗朗等人利用贝叶斯方法在赛季中期分析了18名著名球员前45个击球的有关数据(表2-1第2列),基于该数据对18个人的命中概率进行了估计,并用该结果来预报即将到来的赛季每个人的平均命中率.

表2-1

队员	前45击命中率	剩余命中率	斯坦估计	埃弗朗-莫里斯估计
1	0.400	0.346	0.290	0.334
2	0.378	0.298	0.286	0.313
3	0.356	0.276	0.281	0.292
4	0.333	0.222	0.277	0.277
5	0.311	0.273	0.273	0.273
6	0.311	0.270	0.273	0.273
7	0.286	0.263	0.268	0.268
8	0.267	0.210	0.264	0.264
9	0.244	0.269	0.259	0.259
10	0.244	0.230	0.259	0.259
11	0.222	0.264	0.254	0.254
12	0.222	0.256	0.254	0.254
13	0.222	0.303	0.254	0.254
14	0.222	0.264	0.254	0.254
15	0.222	0.226	0.254	0.254
16	0.200	0.285	0.249	0.249
17	0.178	0.316	0.244	0.233
18	0.156	0.200	0.239	0.208

用分层贝叶斯模型及数据扩充技术来分析这组数据. 令 Y_i 表示第 i 个球员前45个击球的平均命中率(表2-1中第2列);p_i 表示他的命中率真值. 在埃弗朗的研究中,首先对 Y_i 采用了 **VS**(Variance-Stabiliging) **变换**:

$$X_i = \sqrt{45}\arcsin(2Y_i - 1),$$

$$\theta_i = \sqrt{45}\arcsin(2p_i - 1).$$

然后用正态分布 $N(\theta_i, 1)$ 逼近 X_i. 为了构造分层模型,假定 θ_i 独立同分布,并服从正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$. 取 μ 和 σ 的先验分布为 $(-\infty, \infty) \times (0, \infty)$ 上的均匀分布,但

这样做是不恰当的，作为练习，读者可以尝试用其他先验分布，但要注意 σ 的先验分布在 0 点不能是奇异的.

利用吉布斯采样器以及下面两个步骤的迭代来解决这个问题：

(1) 在给定 μ 和 σ^2 的条件下抽取 $\theta_i, i = 1,2,\cdots,18$.

(2) 对于给定的 $\theta_i, i = 1,2,\cdots,18$，抽取 μ 和 σ^2.

图 2-2 所示为基于吉布斯采样逼近所得到的 μ 的后验密度，以及 p_i 的**压缩估计**. 事实上，可以进一步改进上面所用到的吉布斯方法以提高效率.

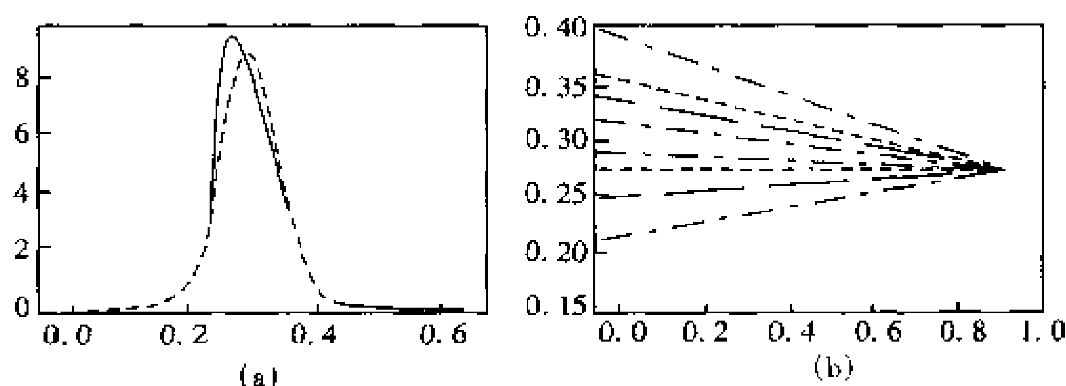


图 2-2

图 2-2(a) 所示的为 μ 的后验密度——吉布斯采样方法(实线)与正态逼近方法(虚线)结果的对比. 实线与 μ 的真实后验密度几乎没有区别. 图 2-2(b) 所示的为压缩估计与极大似然估计的示意图.

2.5 特殊的马氏链蒙特卡罗算法

为了展示在实际应用中如何采用米特罗波利斯 - 哈斯汀准则和吉布斯采样器，下面介绍一些在文献中经常出现的算法.

2.5.1 独立链算法

米特罗波利斯 - 哈斯汀算法中的转移函数 $T(x,y)$ 的一个特殊选择是将它取成独立的试验密度 $p(y)$. 也就是说从密度 p 中产生的位移 y 与先前的状态 $x^{(t)}$ 独立. 哈斯汀(1970) 首先提出的这种方法可以看成是诺伊曼采样和重要度采样的一种变通方法. 这种方法称为米特罗波利斯独立采样(简称 MIS).

这种方法的步骤如下：

(1) 给定当前状态 $x^{(t)}$，抽取 $y \sim p(y)$.

(2) 抽取 $u \sim U[0,1]$，并令

$$x^{(t+1)} = \begin{cases} y & \left(u \leqslant \min\left\{1, \dfrac{w(y)}{w(x^{(t)})}\right\}\right), \\ x^{(t)} & (\text{其他}), \end{cases}$$

其中 $w(x) = \pi(x)/p(x)$ 是通常重要度采样的权函数.

如同诺伊曼方法一样，MIS 的效率依赖于试验密度 $p(x)$ 与目标 π 的接近程度. 为了保证算法的稳健性，一般取 $p(x)$ 为一个重尾分布. 托尼(Tierney,1994)，吉尔曼(Gelman) 和鲁宾(1992) 建议，当从一个条件分布采样比较困难时，可以在吉布斯迭代中插入一个 MIS 步骤. 对于那些用高斯分布可以逼近得很好的条件密度来说，这一思想在许多贝叶斯计算中是有用的. 为了适应于尾部表现非正则的情况，将 $p(x)$ 取成具有重尾的 t 分布是有必要的.

2.5.2 随机游动米特罗波利斯算法

该算法恰好就是前面用来模拟盒子中小球位置分布的算法. 假设目标分布 $\pi(x)$ 定义在 $\mathbf{R}^d$ 上. 给定当前状态 $x^{(t)}$，该算法按下面方式迭代：

(1) 抽取 $\varepsilon \sim g_\sigma$，并令 $y = x^{(t)} + \varepsilon$，其中 g_σ 是一个球对称分布，σ 可以被使用者控制. g_σ 的一个通常取法是取成正态分布 $N(0, \sigma I)$.

(2) 抽取 $u \sim U[0,1]$，并令

$$x^{(t+1)} = \begin{cases} y & (u \leqslant \pi(y)/\pi(x^{(t)})), \\ x^{(t)} & (\text{其他}). \end{cases}$$

2.5.3 希特 - 朗算法

对于给定的当前状态 $x^{(t)}$，**希特 - 朗(Hit-Run) 算法**按如下方式运行：

(1) 均匀地选择随机方向 $e^{(t)}$；

(2) 从密度 $f(r) \propto \pi(x^{(t)} + re^{(t)})$ 中抽取刻度样本 $r^{(t)}$；

(3) 更新状态 $x^{(t+1)} = x^{(t)} + r^{(t)}e^{(t)}$.

该算法的行为很像一个随机方向吉布斯采样器，并且允许自由地选择随机方向. 它看起来对计算那种目标分布多峰的情况是非常有帮助的.

但是，在运行该算法时的一个主要困难是在实际问题中人们几乎不可能从 $f(r)$ 中抽样. 这时人们只能采用一步米特罗波利斯更新.

2.5.4 自适应方向采样算法

吉尔克斯(Gilks)、罗伯特(Roberts) 和乔治(George)(1994) 提出了一种多重链 MCMC 方法——**自适应方向采样**(ADS) 算法，它允许不同链之间进行信息交换. 在 ADS 算法(也称撞球算法) 的每一步迭代中，有一族样本，记之为

$$S^{(t)} = \{X_1^{(t)}, X_2^{(t)}, \cdots, X_m^{(t)}\}.$$

这时 $S^{(t+1)}$ 按如下方式产生：

(1) 在 $S^{(t)}$ 中随机选择一个成员 $X_c^{(t)}$；

(2) 生成一个随机方向 $e^{(t)} = (X_c^{(t)} - X_a^{(t)}) / \| X_c^{(t)} - X_a^{(t)} \|$，其中参照点 $X_a^{(t)}$ 从 $S^{(t)} \setminus \{X_c^{(t)}\}$ 中随机抽取；

(3) 从一个适当的分布 $f(r)$ 中随机抽取一个刻度样本 $r^{(t)}$；

(4) 更新状态，$X_c^{(t+1)} = X_a^{(t)} + r^{(t)}e^{(t)}$，当 $j \neq c$ 时，$X_j^{(t+1)} = X_j^{(t)}$. 吉尔克斯等人(1994)，罗伯特和吉尔克斯(1994) 证明了 $f(r)$ 应该具有如下形式：

$$f(r) \propto |r|^{k-1}\pi(X_a^{(t)} + re^{(t)}).$$

另外,他们也提供了该算法的一般形式,并对如何使用该方法提出一些建议.在实际中使用 ADS 算法的一个主要困难是在 $f(r)$ 中采样常常是不可行的.

2.5.5 切片采样器

假定 $\pi(x)$ 是一个定义在 $\mathbf{R}^d$ 上的目标分布,则抽取 $x \sim \pi(x)$ 等价于在区域 S 上抽取均匀分布样本

$$z = (z_1, z_2, \cdots, z_d),$$

其中 $S = \{z \in \mathbf{R}^{d+1}: z_{d+1} \leqslant \pi(z_1, z_2, \cdots, z_d)\}$. 但是,在一任意区域上抽取均匀分布样本与其他模拟问题同样地困难.这时可以利用下面的吉布斯迭代来抽样:

(1) 抽取 $y^{(t+1)} \sim U[0, \pi(x^{(t)})]$;

(2) 抽取区域 $S^{(t+1)} = \{x: \pi(x) \geqslant y^{(t+1)}\}$ 上的均匀分布样本 $x^{(t+1)}$.

但是,迭代中的区域 $S^{(t+1)}$ 仍然难以处理.当 π 可以写成 k 个函数乘积时,例如,$\pi(x) = f_1(x) \times f_2(x) \times \cdots \times f_k(x)$,爱德华兹和索卡(Edwards and Sokal, 1988)引进了 k 个辅助变量 $y_1, y_2, \cdots, y_k$,并定义了在区域 $0 < y_i < f_i(x), i = 1,2,\cdots,k$ 上均匀抽样的吉布斯采样器:

(1) 抽取 $y_i^{(t+1)} \sim U[0, f_i(x^{(t)})], i = 1,2,\cdots,k$.

(2) 抽取区域 $S^{(t+1)} = \bigcap_{i=1}^{k}\{x: f_i(x) \geqslant y_i^{(t+1)}\}$ 上的均匀分布样本 $x^{(t+1)}$.

戴明(Damien),瓦克菲尔德(Wakefield)和沃克(Walker)1997年证明,在许多情况下可以找到 π 的分解,使得交集 $S^{(t+1)}$ 易于计算,这样便构造了一个容易运行的采样器.但也有人发现,由于引进了辅助变量而使运行速度变慢.

2.5.6 米特罗波利斯化的吉布斯采样器

当人们感兴趣的状态空间是离散的时候,刘军(1996)利用超松弛方法改进了通常的吉布斯采样器,并证明它的优越性.

假定
$$X = (X_1, X_2, \cdots, X_d),$$
其中 X_i 有 m 个可能的值,$\pi(x)$ 是目标分布.在2.4.1小节中所描述的随机扫描吉布斯采样器中,当第一个随机选择的下标为 i 时,当前状态 x_i 更新为 y_i,y_i 是从相应的条件分布中抽取的.这里对上面方法作如下修改:对于值 y_i,它被抽到的概率为

$$P(y_i) = \frac{\pi(y_i \mid x_{[-i]})}{1 - \pi(x_i \mid x_{[-i]})},$$

然后,以哈斯汀(1970)接受概率

$$P_g(y_i) = \min\left\{1, \frac{1 - \pi(x_i \mid x_{[-i]})}{1 - \pi(y_i \mid x_{[-i]})}\right\},$$

用 y_i 更新 x_i,否则 x_i 不变.刘军(1996)证明,在离散情况下上面修改的吉布斯采样器在统计上比随机扫描吉布斯采样器更加有效.

当 $m_i = 2$ 时,吉布斯采样器恰好就是巴克斯(Barkers, 1965)方法,反之,修改后的方法变成米特罗波利斯(1953)等人的算法.拜斯昆(1973)对两种采样器做了比

较.贝萨格(Besag,1995)等人也注意到,对于二进制系统,在增加状态空间的灵活性方面,米特罗波利斯算法显示出它的优越性.这一点被广泛地应用于改进吉布斯采样器上.

2.6　收敛性诊断

基于目标分布 $\pi(x)$ 的正态逼近理论,吉尔曼和鲁宾(1992)提出了一个收敛性诊断方法,该方法由下面几个步骤组成:

(1) 在采样开始之前,取一个可以覆盖目标分布 π 的试验分布 $f(x)$.由 $f(x)$ 产生 m 个(例如取 $m = 10$)独立同分布样本.

(2) 以步骤(1)中产生的 m 个值为初值独立运行 m 个采样器.对每个链迭代 $2n$ 步.

(3) 对于一个感兴趣的刻度,比如说 θ,用最后 n 步迭代产生的样本计算平均链内方差 W 以及均值 $\bar{\theta}$ 与 m 个并行链的方差 B.

(4) 计算压缩因子

$$\sqrt{\hat{R}} = \sqrt{\left(\frac{n-1}{n} + \frac{m+1}{mn} \cdot \frac{B}{W}\right)\frac{\mathrm{df}}{\mathrm{df}-2}},$$

其中 df 为用 t 分布逼近 $\bar{\theta}$ 的经验分布时所对应的自由度.

吉尔曼和鲁宾(1992)建议用 $\bar{\theta} = \log\pi(x)$ 做为诊断指标.

盖耶(Geyer,1992)对吉尔曼和鲁宾方法提出了批评意见,认为它难以应用于 MCMC 计算.盖耶认为应该集中所有资源于一条链的迭代:在一万次迭代中后面的九千个采样应该比十个并行的一千次迭代链更接近于目标分布 π.另外,好的收敛准则可以通过单个链来构成,例如物理学中所采用的自相关时间.

关于 MCMC 方法的一般应用,建议采用一些不同的诊断工具,而不是基于某一个方法或统计量.例如,可以从相对分散的初始点出发,运行 3 到 5 个并行链.这样可以从不同的角度来比较这些链,如某些参数的直方图、自相关图以及吉尔曼 - 鲁宾的 $\hat{R}$.

2.7　更有效的 MCMC 采样器及优化

本节将介绍一些基于 MCMC 基本框架的关于全局最优化和更有效的蒙特卡罗模拟的新的思想.它们之中有些思想已对某些科学领域和计算机工业产生巨大的影响.

2.7.1　模拟退火算法

在凝固态物理中,退火是指通过一个热过程使固体达到一个低能量状态的热处理工艺.该过程有两个步骤:

(1) 将固体加热至一定的温度;

(2) 徐徐冷却使其成为分子规则排列的固体.

在高温情况下,固体组织将发生变化,这时所有分子能够流动而重新排列它们自己;当温度降低时,分子被强迫重新排列以达到一个最低能量状态.由于米特罗波利斯算法可以用来模拟各种温度下分子的运动以达到热平衡,科克帕特里克(Kirkpatrick),格拉特(Gelatt)和瓦克(Vecchi)1983年提出了退火过程的计算机仿真,称之为**模拟退火**(简记SA)**算法**,并将其用于解决组合最优化问题.

假设目的是寻找目标函数 $h(x)$ 的最小值.那么它等价于在任意给定的"温度"T 下寻找 $\exp\{-h(x)/T\}$ 的最大值.令 $T_1 > T_2 > \cdots > T_k > \cdots$ 是一个单调降的温度序列,这里 T_1 充分地大,并且 $\lim\limits_{k\to\infty} T_k = 0$.在每一个温度点 T_k,以 $\pi_k(x) \propto \exp\{-h(x)/T_k\}$ 作为稳态分布,将米特罗波利斯-哈斯汀或吉布斯采样做 N_k 次迭代.随着 k 的增加,π_k 将越来越多的质量(概率为1地)集中在 $h(x)$ 的全局最大值附近.如果M-H迭代的步数 N_k 充分大,将几乎必然地找到全局最优.从算法角度上讲,这只需按下面的步骤进行:

(1) 固定任意一个初始点 x_0 和温度水平 T_1;

(2) 对于每个 k,以 $\pi_k(x)$ 为目标分布将MCMC算法迭代 N_k 步,将最后一步迭代得到的 x 作为下一步的起点;

(3) $k \to k+1$.

如果温度降低的速度充分地慢,比如其速度的阶为 $O(\log(L_k)^{-1})$,其中 $L_k = N_1 + N_2 + \cdots + N_k$,可以证明:SA算法以概率1保证达到全局最大值.在实际中,没有人能够容忍如此慢的退火方案.最常见的是,采用一个线性的,甚至是指数速度的降温方案,但这样将不再能保证达到全局最优.然而,在过去的15年中,许多研究者的经验证实了SA是一个非常有吸引力的一般意义下的最优化工具.

2.7.2　模拟回火及并行回火算法

为了提高MCMC设计的混和速度,马里纳里(Marinari)和派里斯(Parisi,1992)以及盖耶和汤普森(Thompson,1995)提出了**模拟回火**(简记为ST)**算法**.它与模拟退火算法产生于同一灵感.为了运行ST,首先需要通过改变目标分布 π 中的某个参数(称之为温度)来构造一个分布族 $\Pi = \{\pi_i(x); i \in \mathcal{I}\}$.分布 π 对应于该分布族中最高温度值所对应的分布.然后,在扩充的空间 $(x,i) \in \mathscr{X} \times \mathcal{I}$ 上定义一个新的目标函数 $\pi_{ST}(x,i) \propto c_i\pi_i(x)$,这里 c_i 是一受控常数,它的作用是使得每一个温度水平都有机会被访问到.最后,利用MCMC采样器在分布 π_{ST} 中抽取样本.

隐含在ST算法背后的直观背景是通过反复地对分布进行加温,使得新的采样器有可能跳出局部最优的陷阱,并且提高其混和速度.

取初值 $i^{(0)} = 0$ 和 $x^{(0)}$,**ST算法**由下面步骤组成:

(1) 基于当前状态 $(x^{(t)}, i^{(t)}) = (x, i)$,抽取 $u \sim U[0,1]$.

(2) 若 $u \leqslant \alpha_0$,取 $i^{(t+1)} = i$,并由MCMC转移函数 $T(x, x^{(t+1)})$ 中抽取 $x^{(t+1)}$,它保持 π_i 的不变性.

若 $u > \alpha_0$,取 $x^{(t+1)} = x$,并生成一个温度转移 $i^{(t)} \to i'$(通常取一带反射壁的

近邻随机游动),以概率 $P(x) = \min\left\{1, \frac{c_j\pi_j(x)}{c_i\pi_i(x)}\right\}$;否则取 $i^{(t+1)} = i$.

为了顺利地运行 ST,相邻的两个分布 π_i 和 π_{i+1} 需要有较大程度的重叠,并且参数 α_i 也需要细心地调整.为了做到这一点,有时需要取较多的温度水平,但这样做又会影响算法的效率.下一节介绍的动态加权方法可以用来克服温度转移中遇到的能量"高墙".

盖耶(1991)所提出的**并行回火算法**(PT算法)可以看成是ST的"双胞胎".代替将 $\mathscr{X}$ 扩充成 $\mathscr{X}\times\mathscr{I}$,盖耶建议将 $\mathscr{X}$ 扩充成乘积空间 $\mathscr{X}_1\times\mathscr{X}_2\times\cdots\times\mathscr{X}_I$,其中 $\mathscr{X}_i$ 是 $\mathscr{X}$ 的拷贝.假定 $(x_1, x_2, \cdots, x_I)\in\mathscr{X}_1\times\mathscr{X}_2\times\cdots\times\mathscr{X}_I$.对于分布族 $\Pi = \{\pi_i, i = 1, 2, \cdots, I\}$,定义乘积空间上的联合概率分布

$$\pi_{pt}(x_1, x_2, \cdots, x_I) = \prod_{i\in I}\pi_i(x_i).$$

在每一个空间 $\mathscr{X}_i$ 上并行运行 MCMC 算法.通过一个指标交换算子来控制 ST 中的温度转移.

PT 算法的严格定义如下:

(1) 假定当前状态 $(x_1^{(t)}, x_2^{(t)}, \cdots, x_I^{(t)})\in\prod_{i\in I}\mathscr{X}_i$.抽取 $u\sim U[0,1]$.

(2) 若 $u\leqslant\alpha_0$,则执行并行步骤,也就是,利用 MCMC 算法将每个 $x_i^{(t)}$ 更新为 $x_i^{(t+1)}$.

若 $u > \alpha_0$,则执行交换步骤,即随机选择近邻对,比如 i 和 $i+1$,并推荐一个 $x_i^{(t)}$ 和 $x_i^{(t+1)}$ 的交换.以概率

$$P(x) = \min\left\{1, \frac{\pi_i(x_{i+1}^{(t)})\pi_{i+1}(x_i^{(t)})}{\pi_i(x_i^{(t)})\pi_{i+1}(x_{i+1}^{(t)})}\right\}$$

接受交换.

该方法在模拟复杂系统,例如分子结构时是非常有用的.在处理统计物理模型时,这个方法也受到普遍欢迎.与ST算法相比较,PT算法不需要仔细地调整正规化常数,可以同时利用来自多重 MCMC 采样链的信息.

2.7.3 MCMC 中的动态加权

王和梁(1997)在控制马氏链模拟时引进了动态加权变量.利用这一技巧,许多优化问题得到了更好的结果,例如:货郎担问题、神经网络训练和高维积分问题.

为了使用**动态加权**方法,首先将样本空间 $\mathscr{X}$ 扩充到 $\mathscr{X}\times\mathbf{R}^+$ 上,使得它可以包括权变量.与米特罗波利斯算法相似,也需要空间 $\mathscr{X}$ 上的转移函数 $T(x, y)$.假定第 t 步的迭代结果为 $(x^{(t)}, w^{(t)}) = (x, w)$,则一个 R 型运动定义如下:

(1) 从 $T(x, y)$ 中抽取 y 并计算米特罗波利斯比

$$r = \frac{\pi(y)T(y, x)}{\pi(x)T(x, y)}.$$

(2) 选择 $\theta = \theta(w, x) > 0$,抽取 $U\sim U[0,1]$,令

$$(x^{(t+1)}, w^{(t+1)}) = \begin{cases} (y, wr(x,y) + \theta) & \left(U \leqslant \dfrac{wr(x,y)}{wr(x,y) + \theta} \right), \\ \left(x^{(t)}, \dfrac{w(wr(x,y) + \theta)}{\theta}\right) & (\text{其他}). \end{cases} \tag{2-5}$$

容易验证对于 R 型运动，π 不再是它的稳态分布. 王和梁提出重要性权的不变性 (IWIW) 来为上面的算法辩护. 也就是说，假设 (x, w) 的分布是 $f(x, w)$，如果 $\sum_w wf(x,w) \propto \pi(x)$，则称权 w 相对于 π 是准确的. 如果对于 (x, w) 的联合分布，它保持权的准确性不变，则称转移准则满足 IWIW. 显然，R 型运动满足 IWIW.

把重要性权引进动态蒙特卡罗过程的目的是为系统提供一个手段，通过米特罗波利斯转移准则来控制大的转移. 权变量是在允许对非米特罗波利斯运动所引起的偏差进行调整的方式下进行更新的.

2.7.4 可逆跳跃

在贝叶斯模型选择这样**可逆跳跃**的应用中，人们常常需要一种可以在不同维空间之间跳跃的采样器. 从原理上讲，仍然可以按米特罗波利斯 - 哈斯汀准则来设计这样一个采样器.

假设 $\mathscr{X}$ 对应一个较高维的空间，$\mathscr{Y}$ 对应一个低维空间. 为了在两个空间之间进行通信，需要有两个转移函数，一个是从 $\mathscr{Y}$ 到 $\mathscr{X}$，另一个是从 $\mathscr{X}$ 到 $\mathscr{Y}$. 由于 $\mathscr{Y}$ 是一个低维空间，任何一个由 $\mathscr{Y}$ 到 $\mathscr{X}$ 的转移函数都是一个关于 $\mathscr{X}$ 的控制测度的退化的密度，这意味着并不是所有从 $\mathscr{X}$ 到 $\mathscr{Y}$ 的转移都是可逆的. 为了克服这一困难，必须有一个"配偶空间" $\mathscr{Z}$，使得 $\mathscr{Y} \times \mathscr{Z}$ 与 $\mathscr{X}$ 有相同的维数，以及一个配偶采样分布 $p(z \mid y)$. 利用配偶空间，可以定义两个非退化的转移函数：$T_1: \mathscr{Y} \times \mathscr{Z} \to \mathscr{X}$ 和 $T_2: \mathscr{X} \to \mathscr{Y} \times \mathscr{Z}$，并且按米特罗波利斯 - 哈斯汀准则来设计跳跃.

例如，为了从 $\mathscr{Y}$ 跳跃到 $\mathscr{X}$，首先抽取 $z \in \mathscr{Z}$ 服从分布 $p(z \mid y)$，然后从 $T_1((y,z), \cdot)$ 中抽取 x'. 以概率

$$\alpha = \min\left\{1, \frac{T_2(x', (y,z))}{T_1((y,z), x')g_1(z \mid y)}\right\}$$

接受该转移. 通过 T_2 从 $\mathscr{X}$ 到 $\mathscr{Y}$ 的跳跃 $x \to (y', z')$ 按接受概率

$$\beta = \min\left\{1, \frac{T_1((y', z'), x)g_1(z' \mid y')}{T_2(x, (y', z'))}\right\}$$

来完成.

2.7.5 多重网格蒙特卡罗和广义吉布斯采样

多重网格方法首先是在计算数学领域为求解偏微分方程而开发的. 它的主要思想是在空间的不同网格点上交替地应用迭代算法. 当对粗分的网格进行计算时，误差的低频成分能迅速地暴露出来，然而，当在细分的网格上计算时，高频成分会被排除掉. 古德曼(Goodman) 和索卡(Sokal)1989 年将这一思想应用于统计物理模

型的蒙特卡罗计算,并将其命名为**多重网格蒙特卡罗**(简记为 MGMC).他们把这种多重网格思想转换成一种递进式全局移动的设计方式,代替吉布斯采样中每步迭代只更新一个分量的方式.MGMC 建议沿着一定的子空间,同时移动几个高度相关的分量.刘军和萨巴蒂(Sabathe)(1998)把 MGMC 中的这一关键步骤推广到统计应用中.

刘军和吴(1999)发现,事实上 MGMC 是吉布斯采样器的一个推广,并且从变换群的观点来看,MGMC 中的每步移动可以被推断.令 $\mathscr{G}$ 是 x 的空间上的一个局部紧变换群.由初始点 $x^{(0)}$ 开始,从 $x^{(t)}$ 到一个新的点的群移动可以通过如下方式完成:

从条件分布

$$p(g) \propto \pi(g(x^{(t)}))\mid J_g(x^{(t)})\mid H(\mathrm{d}g)$$

中抽取 $g \in \mathscr{G}$,其中 J_g 是变换的雅可比矩阵;H 是 $\mathscr{G}$ 的左哈尔(Haar)测度.令 $x^{(t+1)} = g(x^{(t)})$,可以证明,这样一个移动能保持 π 不变.

2.7.6 多重试验米特罗波利斯(MTM)算法

MTM 是米特罗波利斯-哈斯汀转移准则的一个有趣的推广.这个新准则使得 MCMC 采样器做大步的跳跃成为可能.当判别出某个有意义的方向,但是由于条件分布原因而难以使用吉布斯采样器时,该方法将会特别有用.因此,MTM 可以与希特-朗以及 ADS 算法结合起来使用.下面两个算法是相似的,即使 T 是对称的,它们也不是等价的.

1.算法 1

(1) 从分布 $T(x,y)$ 中抽取 $y_1, y_2, \cdots, y_k$,计算

$$g(x,y_j) = \pi(x)T(x,y_j), \tag{2-6}$$

以及 $g(y_j,x), j = 1,2,\cdots,k$.

(2) 根据概率 $g(y_j,x), j = 1,2,\cdots,k$,选择 $Y = y_l$.然后,从分布 $T(y_l,x^*)$ 中抽取 $x_1^*, x_2^*, \cdots, x_{k-1}^*$,并令 $x_k^* = x$.

(3) 以概率

$$P(y,x) = \min\left\{1, \frac{g(y_1,x) + \cdots + g(y_k,x)}{g(x_1^*,y_l) + \cdots + g(x_k^*,y_l)}\right\}$$

接受 y_l.

2.算法 2

(1) 从对称分布 $T(x,y)$ 中抽取 k 个值 $y_1, y_2, \cdots, y_k$.

(2) 依概率 $\pi(y_j)(j = 1,2,\cdots,k)$ 抽取 $Y = y_l$.然后从分布 $T(y_l,x')$ 中抽取 $x'_1, x'_2, \cdots, x'_{k-1}$,并令 $x'_k = x$.

(3) 以概率

$$P(y) = \min\left\{1, \frac{\pi(y_1) + \pi(y_2) + \cdots + \pi(y_k)}{\pi(x'_1) + \pi(x'_2) + \cdots + \pi(x'_k)}\right\}$$

接受 y_l.

容易证明上面两个转移函数满足平衡条件,因此,所诱导的可逆马氏链以 $\pi(x)$ 为其不变分布.

3　投影寻踪方法

3.1　概　　述

人类生活在信息的世界里,而信息又常常隐藏在以不同形式表现出来的大量数据的背后,挖掘数据和建模过程中的第一步就是探索数据,如果数据是低维的,则这样情形下的探索是直接的:可以通过直方图对一维数据进行观察;可以通过散布图对二维数据进行了解;通过分片散布图对三维数据进行了解.但在许多情况下数据是高维的,而人类的视觉却被限制在低维情形,所以,人们常常希望通过低维投影来了解数据的高维结构.由于一个高维数据可以有无穷多的低维投影,因此,发展一套能够在短时间里发现高维数据有趣的结构的实用技术是非常重要的.投影寻踪就是这样一种能够通过将高维数据线性投影到一个低维空间来寻找人们感兴趣的非线性结构的现代统计技术.这里所说的低维通常是指一维、二维或三维,这种将投影和寻踪结合起来的思想至少可追溯到克鲁斯卡尔(Kruskal)和施瓦兹(Switzer).第一个成功地应用这种思想的人应当是弗里德曼(Friedman)和图戈伊(Tukey)(1974),他们给了这种思想一个最恰当的名字:投影寻踪(projection pursuit)简称PP.它作为一个特殊的数学记号是由尤伯(Huber,1985)首先引进的,他的工作为20世纪80年代展开对PP的深入研究奠定了基础.值得注意的是,在我国有一大批有影响的优秀的PP方面的学者.

PP方法所要寻找的有意义的结构包括:散布、分割、特定模式、形状以及任何其他的非线性结构.这里的非线性结构是相对线性结构而言的,那些能够通过对样本均值和协方差阵的分析、主成分分析或其他经典多元分析方法而获得的结构都是线性结构;而非线性结构是指那些基于均值和协方差阵的分析所不能得到的结构.

投影寻踪有两种类型:**机械PP**和**手工PP**.机械PP是指弗里德曼和图戈伊(1974)引进的,后来经尤伯正规化的PP,常常被简称为PP.运行PP中的两个核心部分是PP指标和PP算法.**PP指标**用来度量一个投影是否有意义,指标值越大表明相应的投影越有意义.**PP算法**是一个最优化的算法,它分步骤地在一个高维空间上极大化PP指标.机械PP,是基于PP算法的计算过程来寻找并输出一个投影序列(极大化一个PP指标)供人们观察;相反,手工PP是利用一个动态图形系统,通过人的肉眼的观察来寻找有意义的投影方向,如果数据的维数比较高,或使用者缺乏经验,那么手工PP是不可行的.一个实用的方法或许就是按适当的方式组合使用机械PP和手工PP.下面介绍的内容包含投影寻踪的基本内容,以及目前关于构造组合PP交互投影寻踪方面的有关讨论.

3.2 探索性投影寻踪

上面所述的是探索性 PP,如同它最初被用于探索性数据分析那样.因此,PP 严格说是探索性机械 PP.后面将看到,投影寻踪的作用远超过探索性数据分析,例如,它用于回归分析,导致产生了现在的投影寻踪回归(PPR) 方法.

1. PP 指标的选择

首先,令 $\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_n\in\mathbf{R}^p$ 是一个 p 维样本.数据的一个低维(k 维) 投影为 $\boldsymbol{Z}_1,\boldsymbol{Z}_2,\cdots,\boldsymbol{Z}_n\in\mathbf{R}^k$,其中 $\boldsymbol{Z}_i=\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_i$,$\boldsymbol{\alpha}$ 是一个 $p\times k$ 正交矩阵,使得 $\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{I}_k$.如果 $k=1$,则 $\boldsymbol{\alpha}$ 是一个单位向量,这时可称之为*方向*.PP 算法的输出 $\boldsymbol{\alpha}$(它极大化一个 PP 指标) 称之为最优解.

为了定义一个 PP 指标,就必须解释这样一个指标的意义.在什么是一个平凡方向这一点上是容易达成共识的.一个投影寻踪指标 $I(\alpha)$ 是一个参照分布和投影后数据的分布之间的某个距离的估计(对估计量和距离不同的选择,可以得到不同 PP指标).一个自然的平凡分布是标准正态分布 $N(0,1)$,因为正态分布是最简单的也是被研究得最彻底的分布.

狄考尼斯和弗里德曼(Diaconis and Friedman,1983) 以及其他学者在解释为什么说正态分布是一个平凡分布时讲到:"…… 一个投影是平凡的,如果投影结果是随机的或无结构的.一个度量随机性的指标是熵,如果说一个投影是有意义的,那么与其他投影相比,它应该有较小的熵.如果固定刻度,高斯分布将达到极大熵,这一点说明 …… 如果它远离高斯分布,那么这个投影就是有意义的".直观上可以看到,使 PP 指标达最大的投影(以正态分布作为参照分布) 是最有意义的(或许可称之为远离正态投影).这样的指标同样适用于以其他分布作为参照分布的情形.

例 1 (勒让德(A.M.Legendre) 指标) 弗里德曼(1987) 提出的一维和二维($k=1,2$)PP 指标的构造方法如下:

假定 $E(X_i)=0,\mathrm{cov}(X_i)=I_p$.记 $\phi(z)$ 和 $\Phi(z)$ 为标准正态随机变量的密度和分布函数.

当 $k=1$ 时,投影数据为 $\boldsymbol{Z}_i=\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_i\in\mathbf{R}$.在变换 $R=2\Phi(z)-1$ 下,投影数据的密度函数被变换成 $q_\alpha(r)$,这里 $q_\alpha(r)$ 是随机变量 $R_i=2\Phi(\boldsymbol{Z}_i)-1$ 的密度函数,$\phi(z)$ 变换后为$(-1,1)$ 上的均匀分布的密度函数 $f(r)=1/2$.q_α 和$f(r)$ 的 $\mathscr{L}_2$ 距离的勒让德多项式展开为

$$\int_{-1}^{1}(q_\alpha(r)-1/2)^2\mathrm{d}r\sim\sum_{j=1}^{m}(E_\alpha\{a_j(R)\})^2,\qquad(3\text{-}1)$$

其中 m 为展开式的项数;E_α 是关于$R_i=2\Phi(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_i)-1$ 的分布意义下的数学期望;$a_j(r)=(j+1/2)^{1/2}$ 是 j 阶正交多项式,

$$\begin{cases}\displaystyle\int_{-1}^{1}a_i(r)a_j(r)\mathrm{d}r=1 & (i=j),\\ \displaystyle\int_{-1}^{1}a_i(r)a_j(r)\mathrm{d}r=0 & (i\neq j).\end{cases}$$

对于 $r \in (-1,1)$，勒让德多项式的递推公式如下：

$$L_0(r) = 1, \quad L_1(r) = r,$$

$$L_j(r) = \frac{1}{j}((2j-1)rL_{j-1}(r) - (j-1)L_{j-2}(r)) \qquad (j = 2,3,\cdots).$$

实际上，$E(X_i)$ 和 $\mathrm{cov}(X_i)$ 是任意的，X_i 的分布是未知的. 基于 X_i 的数据 $\tilde{X}_i$，弗里德曼的 m 项一维勒让德指标是式(3-1)的简单估计：

$$I_m^{\mathrm{F}}(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{j=1}^{m} \frac{2j+1}{2}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_j\{2\Phi(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\tilde{X}_i) - 1\}\right)^2. \tag{3-2}$$

来自 X_i 的球化数据 $\tilde{X}_i$ 满足

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i = 0,$$

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \tilde{X}_i\tilde{X}_i^{\mathrm{T}} = I_p. \tag{3-3}$$

例如，弗里德曼球化方法是

$$\tilde{X}_i = \hat{D}^{-1/2}\hat{U}^{\mathrm{T}}(X_i - \overline{X}) \qquad (i = 1,2,\cdots,n),$$

其中 $\hat{U}\hat{D}\hat{U}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{\Sigma}$ 是样本协方差阵

$$\boldsymbol{\Sigma} = (1/n)\boldsymbol{\Sigma}(X_i - \overline{X})(X_i - X)^{\mathrm{T}}$$

的特征值-特征向量分解，

$$\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$$

是样本均值.

一维 PP 为人们提供了视野，使人们可以沿着使一维 PP 指标达最大的那些方向去观察数据；二维 PP 则可以使人们在由两个使二维 PP 指标达到最大的正交方向确定的平面上考察数据. 通过一维和二维投影人们可以容易发现某些结构. 利用相同的变换及多项式，弗里德曼的二维勒让德指标为

$$\begin{aligned} I_m^{2\mathrm{F}}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= \sum_{j=1}^{m} \frac{2j+1}{4}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_j\{2\Phi(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\tilde{X}_i) - 1\}\right)^2 \\ &= \sum_{k=1}^{m} \frac{2k+1}{4}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_k\{2\Phi(\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\tilde{X}_i) - 1\}\right)^2 \\ &= \sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{m-j} \frac{(2j+1)(2k+1)}{4} \times \\ &\quad \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L_j\{2\Phi(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\tilde{X}_i) - 1\}L_k\{2\Phi(\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\tilde{X}_i) - 1\}\right)^2, \end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in S^{k-1}$，$\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta} = 0$；$L_j$ 是与式(3-2)中相同的勒让德多项式.

例2（埃尔米特(Hermite)指标） 豪(Hall)1989年提出了一个与弗里德曼不同的指标. 他直接利用 $Z_i = \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}X_i$ 的密度与标准正交密度间的 $\mathscr{L}_2$ 距离的前 m 项埃尔米特多项式展开构造了投影指标，即

$$I_m^{\mathrm{H}}(\alpha)=\sum_{j=1}^{m}\frac{\sqrt{\pi}}{j!\times 2^{j-1}}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathrm{H}_j(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_i)\phi(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_i)\right)^2+$$
$$2\pi^{1/2}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\phi(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_i)-\frac{1}{\sqrt{2}\pi^{1/4}}\right)^2.$$

其中 $\phi(r)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(\frac{r^2}{2})$ 是标准正态随机变量的分布密度函数；H_j 是埃尔米特正交多项式(关于 ϕ 正交)：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{H}_j(r)\mathrm{H}_i(r)\phi^2(r)\mathrm{d}r=\frac{j!\times 2^{j-1}}{\sqrt{\pi}}\qquad(i=j),$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{H}_j(r)\mathrm{H}_i(r)\phi^2(r)\mathrm{d}r=0\qquad(i\neq j).$$

埃尔米特多项式有如下递推公式：

$$\mathrm{H}_0(r)=1,\quad \mathrm{H}_1(r)=2r,\quad \mathrm{H}'_j(r)=2j\mathrm{H}_{j-1}(r)\qquad(j=2,3,\cdots).$$

此外还有其他一些指标，它们分别是基于科尔莫戈罗夫(A.N.Kolmogorov)(李国英和成平,1993)的峰度、斜度和低阶多项式(约翰森和约翰斯通(Johansen and Johnstone)1989)，克拉默-冯·密斯-斯米尔诺夫(Cramer-Von Mises-Smirnov)统计量(成平,1998)及卡方指标(博赛(Posse),1995)等.

参照分布选择的余地也是非常大的，包括线性和非线性结构的分布.对于特定的非线性结构，不同类型指标的敏感度是不同的，甚至相同类型的指标，对于不同的 m 值和 k 值，其敏感性也是不同的.通常使用的 PP 指标是距离，例如式(3-1)中的右式，而不是式(3-2)所示的球化数据下距离的估计.各种重要的非线性结构下不同指标的比较工作还有待进一步研究.目前，基于有限的经验，以及

(1) 在 PP 的应用中，多项式迭代在计算方面比较容易而且有较快的速度；

(2) 科尔莫戈罗夫统计量主要用于检验某统计量与正态分布或均匀分布的差别；

(3) 样本矩，例如峰度、斜度常常难以捕捉到非线性结构，如散布，多峰性，分离等，

可以认为，从寻找非线性结构这一角度来看，多项式型的指标更加可取(如 PPR 中的勒让德指标和埃尔米特函数).

但是，任何 PP 的使用者，尤其是初用者，如果可能的话，应当尝试不同的 PP 指标.

实际上，在投影寻踪方法中使用球化数据是非常重要的.大多数 PP 指标是按下面方式获得的：在假定 $E(\boldsymbol{X}_i)=0,\mathrm{cov}(\boldsymbol{X}_i)=\boldsymbol{I}_p$ 下，构造某个度量的估计，然后用球化数据代替 $\boldsymbol{X}_i$，并将该估计取做 PP 指标.

需要重申的是，PP 的目的是发现有意义的非线性结构.常见的统计量，如样本均值和协方差，只可以揭示数据集的位置、刻度、相关结构.因此，一个有效的 PP 指标应是位置、刻度和旋转变换下不变的，即

$$I(\cdot\mid S\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}+\boldsymbol{b})=I(\cdot\mid \boldsymbol{X}),\tag{3-4}$$

对于任意 $S>0,\boldsymbol{b}\in\mathbf{R}^p$ 和 $p\times p$ 正交矩阵 $\boldsymbol{A}$ 成立.如果在 PP 指标中使用球化数据，

那么这种不变性自动成立. 换句话说,球化可以除去非线性结构中的线性结构. 同样,在运行一个PP程序时对数据进行球化可以获得计算上的好处,可以大大地提高搜索数据的非线性结构的效率.

但是满足式(3-3)的球化数据会使得勒让德、埃尔米特和其他多项式指标的前两项比其他项明显地小. 因此在多项式指标中,孙嘉阳建议取 $3 \leqslant m \leqslant 6$.

2. PP算法的选择

选择PP算法,重要的是最优化算法要确实可以提供相应PP指标的全局最大值,或者最初的解可以提供最有意义的投影. 弗里德曼(1987)对他的一维和二维PP指标给出了一种实用的PP算法(提供在STATLLB软件中),在他的工作中采用了一个称之为"结构迁移"的聪明的想法. 结构迁移是指沿一个最优方向将数据变换成标准正态分布,而使沿其他正交方向上的结构保持不变. 它有如下的效果,即已经被发现的最优方向不会被重新发现. 因为正态结构是平凡的,它将使得指标最小化. 孙嘉阳(1993)发现弗里德曼PP算法的前 p 个最大值常常非常接近全局最大值. 基于这一点,她提出了一种更有效的搜索算法,这里不再介绍.

PP算法的解,可以作如下解释:如果解 $\boldsymbol{\alpha}$ 接近 $(1,0,\cdots,0)$,则它说明第一个坐标或数据的第一个分量是有意义的;如果 $\boldsymbol{\alpha}$ 接近 $(1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2},\cdots,0)$,则它说明数据的第一个分量和第二个分量的差可能是有意义的结构.

3.3 显著性水平

投影寻踪算法的解是否总能提供一个有意义的结构呢?尽管数据来自于多元正态分布,投影寻踪算法也会给出一些解或投影 $\boldsymbol{\alpha}$. 有关一个表面上的结构是否是真实的讨论最早出现在米勒(Miller,1985)关于尤伯(1985)文章的讨论中:"关于这一新技术(指PP),我感到在理论与实际之间存在一个分歧,那些有意义的形状、散布和聚类在高维数据情况下更加难以发现,我们怎样来评价这些结构是真实的或是随机因素造成的呢?"因此,找到一个显著性检验来判断表现出来的结构是真实的或是由随机因素造成的是非常重要的. 对于这样一个显著性检验,其零假设是

$$H_0: \text{投影是平凡的(或数据来自正态分布)}.$$

对于这样的检验,一个自然的检验统计量是

$$T(X) = \max_{\alpha} I\left(\frac{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{X}}\right),$$

其中 $I\left(\frac{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{X}}\right)$ 是一个PP指标. 较大的 $T(\boldsymbol{X})$ 值将支持零假设,即投影是平凡的. 为了发现 $T(\boldsymbol{X})$ 的值到底多大或者计算一个 P 值:

$$P_{H_0}\{T(\boldsymbol{X}) > t(\boldsymbol{X})_{\text{obs}}\},$$

人们可以在零假设下利用蒙特卡罗方法去模拟 $T(\boldsymbol{X})$,其中 $t(\boldsymbol{X})_{\text{obs}}$ 是 $I(\boldsymbol{\alpha}^* \mid \boldsymbol{X})$ 的观测值,$\boldsymbol{\alpha}^*$ 是 $I(\boldsymbol{\alpha} \mid \boldsymbol{X})$ 的极大值点,P_{H_0} 是相对于零假设下的概率. 不幸的是,在投影寻踪中的蒙特卡罗方法中包含了复杂的最优化问题的重复求解,而且在零

假设下目标函数可能非常的不规则，因此它需要较大的计算量. 任何能够对蒙特卡罗模拟有帮助的工作都将是非常有用的.

孙嘉阳(1991) 给出了一个关于弗里德曼一维 PP 指标的显著水平(或 P 值) 的理论上的逼近

$$P_{H_0}\{\max_{\alpha:\alpha^{\mathrm{T}}\alpha=1} I_m^{\mathrm{F}}(\alpha) \geqslant a\} \sim \kappa_0\psi\left(ma, \frac{1}{2}(p+m-3)\right)+ \kappa_2\psi\left(na, \frac{1}{2}(p+m-5)\right). \tag{3-5}$$

其中 a 是指标的观测值；κ_0 和 κ_2 是两个常数；$\psi(x, d) = \int_x^{\infty} u^{d-1}\mathrm{e}^{-u}\mathrm{d}u$ 是不完全伽玛函数. 对于不同的 p 和 m，孙嘉阳提供了关于 κ_0 和 κ_2 的两个表.

当 na 不太小的时候式(3-5) 逼近得很好. 如果 n 不太大，而 a 较小时，可只取式(3-5) 中的第一项. 如果必要的话可根据经验利用该公式计算 P 值，并对该值进行调整. 可利用弗莱舍尔(Fleischer)，劳德(Loader) 和孙嘉阳(1998) 所开发的软件表计算 P 值. 孙嘉阳所提供的计算 P 值的方法从原理上讲也适用于所有的多项式或多项式函数指标.

从直观上讲，一个投影是平凡的，如果它是随机的，或者表现出正态结构，因此，一个 PP 指标等价于检验非正态性. 然而，在 PP 和多元正态检验之间有一些细微的差别. PP 的目的在于从多个角度去了解多元数据集. 从一个好的 PP 方法中所得到的投影通常对应于指标的几个局部极值点. 但是，在多元正态性检验中，人们常常仅关心最大值点. 对于 PP 算法所得到的特定的投影方向，由式(3-5) 所提供的 P 值可以告诉人们这个方向是否有意义. 对于过程而言，P 值可能是保守的，如同 α 对应的投影可能仅仅是指标的一个局部极值一样. 最后一个细微差别是所有的 PP 指标都可以用于数据集的正态性检验，但并不是所有的正态性检验对于非线性结构都是敏感的，而这种非线性结构恰是 PP 所要寻找的.

PP 中 P 值的一个副产品是它可帮助使用者决定何时停止一个 PP 算法. 连续大的 P 值表明或许没有有意义的结构剩下来.

总而言之，在 PP 指标、算法以及 P 值的帮助下，通过将数据投影到由 $\boldsymbol{\alpha}_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2$，… 所确定的低维空间上，使用者可以识别并观察到有意义的结构，这里 $\boldsymbol{\alpha}_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2$，… 是利用算法找到的指标的极值点序列.

3.4 投影寻踪回归

设 $\boldsymbol{X}$ 是一个 p 维预报变量，$\boldsymbol{Y}$ 是响应变量，投影寻踪回归(PPR) 是通过岭函数的有限和

$$f^{(m)}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} g_i(\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}), \tag{3-6}$$

基于来自于$(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ 分布的随机样本(X_1, Y_1)，(X_2, Y_2)，…，(X_n, Y_n) 去逼近回归函数

$$f(\boldsymbol{x}) = E(\boldsymbol{Y} \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}).$$

其中岭函数定义在投影数据 $\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 的值域上，$\boldsymbol{\alpha}_i$ 是第 i 个投影矩阵，使得 $\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_i = \boldsymbol{I}$，$\boldsymbol{I}$ 是一个 $p \times k$ 单位矩阵．模型式(3-6) 所示的 PPR 相当一般．对于适当选择的 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 和 g_i，当 $m \to \infty$ 时，它可以对一大类函数 f 逼近得很好．例如下面一些模型可以看成是特殊的 PPR 模型：

(1) 简单线性回归　$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$、$k = 1$；

(2) 单指标模型　$f(\boldsymbol{x}) = g(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})$；

(3) 具有一个隐含层的神经网络模型　$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} g_i(\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})$，

其中 g_i 是已知函数，例如 $g_i(x) = 1/(1 + \mathrm{e}^{-x})$；

(4) 可加模型　$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{p} g_i(\boldsymbol{x}_i)$，

其中 $\boldsymbol{x}_i$ 是第 i 个分量．

从逼近角度讲，狄考尼斯等人(1984) 对 PPR 拟合给出了一个数学上的理由．有许多拟合 g_i 和$\boldsymbol{\alpha}_i$ 的算法，一个分片 PPR 算法可以在弗里德曼和斯图尔兹(1981) 的文章中找到．特别地，对于 $i \geqslant 1$，给定 $f(0) = 0$，基于投影数据(z_j, r_j)，通过指标的极大化可以得到 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 的迭代估计，通过一个低维的非参数回归估计可得到 g_i，其中 $r_j = Y_j - f^{(i-1)}(\boldsymbol{x}_j)$ 是第 i 步的残差，$z_j = \boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}x_j$，$j = 1, 2, \cdots, n$．重复该方法直到残差平方和$\sum r_j^2$ 小于预先给定的值．根据 g_i 光滑性的不同，或不同的指标以及不同的拟合阶数，可以用不同的 PPR 算法．

这里有这样几个重要问题：预定的残差值如何取或者说何时停止 PPR 算法，或者说如何选择 m？给定一个拟合函数 $\widehat{g}_i$，它是否与常数有显著差别？检验"H_0：g_i = 常数"的显著水平是否也能够被解释，如同在回归中通过拟合项 $\widehat{g}_i$ 一样？所有这些问题相互间是有联系的．帕克(Park) 和孙嘉阳(1998) 将约翰森和约翰斯通的 PPR 方法由正态预报推广到任意密度的预报，并且提供了 H_0 的显著性检验．P_0 值的显著性检验对何时停止 PPR 算法以及通过每个拟合项来解释回归是有帮助的．这里不再详述．

3.5　投影寻踪密度估计

投影寻踪密度估计(PPDE) 的思想是利用

$$g^{(m)}(\boldsymbol{x}) = g_0(\boldsymbol{x}) \prod_{i=1}^{m} g_i(z_i)$$

去逼近一个高维数据 $\boldsymbol{X} \in \mathbf{R}^p$ 的密度，其中 $z_i = \boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^k$，$i = 1, 2, \cdots, m$，$g_0$ 是一个平凡的密度或初始模式，g_i 是基于有意义的数据投影的低维密度．尤伯(1985) 证明：如果 g 是f 的任意一个逼近，则在**相对熵** $E(f, g) := E_f\log\{f(\boldsymbol{x})/g(\boldsymbol{x})\}$ 意义下最大可能的改进为

$$g^*(x) = g(x)g_1(\alpha^T x),$$

其中
$$g_1(\alpha^T x) = \frac{f_\alpha(\alpha^T x)}{g_\alpha(\alpha^T x)}.$$

这里 E_f 是关于 f 的数学期望，f_α 和 g_α 是 f 和 g 关于 $z = \alpha^T x$ 的边缘密度；在 α 的所有选择中，改进最大的 α 使 $E(f_\alpha, g_\alpha)$ 达最大.

g_0 的一个典型的选择是正态密度，它的均值和方差可以用来自 f 的随机样本 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的样本均值和样本方差来估计. 一个分片 PPDE 算法定义如下.

(1) 令 $g^{(0)} = g_0$.

(2) 给定 $g^{(k-1)}$，求解使下面指标极大化的 α：

$$I(\alpha) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log\left(\frac{\hat{f}_\alpha(z_i)}{\hat{g}_\alpha^{(k-1)}(z_i)}\right). \tag{3-7}$$

其中 $\hat{f}_\alpha$ 是基于 $z_1, z_2, \cdots, z_n$ 的边缘密度的估计量；$\hat{g}_\alpha^{(k-1)}$ 是基于密度 $g^{(k-1)}$ 的蒙特卡罗样本在方向 α 上的投影的密度估计.

(3) 令

$$g_k(\hat{\alpha}^T x) = \frac{\hat{f}_{\hat{\alpha}}(\hat{\alpha}^T x)}{\hat{g}_{\hat{\alpha}}^{(k-1)}(\hat{\alpha}^T x)},$$

及

$$g^{(k)}(x) = g^{(k-1)}(x)g_k(\hat{\alpha}^T x).$$

重复步骤(2)和(3)直到 $\max_\alpha I(\alpha)$ 小于一个预先取定的值. 尤伯(1985)证明：如果 f 是某个密度 $\bar{f}$ 与标准正态密度 ϕ 的卷积，则由上面算法所得到的 $g^{(m)}$ 在 $\mathscr{L}_\infty$ 模型下一致收敛.

弗里德曼通过加权 $\mathscr{L}_2$ 距离 $\int (f_\alpha(z) - g_\alpha(z))^2/g_\alpha(z)\mathrm{d}z$ 逼近相对熵 $E(g_\alpha, f_\alpha)$，以及用一个有限勒让德多项式展开逼近 $\hat{f}_\alpha(z_i)/g_\alpha^{(l-1)}(z_i)$，获得了一个不同的 PPDE 算法. 如果 g_α 和 f_α 相距较近，则弗里德曼的第一个逼近是有效的，但这并不是必要条件，尤伯(1985)所提出的修正方法不适用于这个方法. 从逼近论角度来看，在弗里德曼方法中如何进行修正是一个没有解决的问题.

3.6 投影寻踪判别分析

在统计中判别分析的一个同义词是聚类，因此，可以将投影寻踪判别分析缩写成 PPC 或 PPDA. 判别分析的目的是对一个个体进行定位或将一个新的观察结果归于按主观确定的若干个类中的某一个中. 当有一个训练样本和一个检验样本时，判别分析问题便被提了出来. 训练样本被用来构造判别或聚类准则，而检验样本则被用来校准或优化该准则.

假定 $f_j(x)$ 是类 j 分布的密度函数，$j = 1, 2, \cdots, g$，δ 是判别准则，基于该准则，

如果 $x \in \mathscr{R}_j$，这里 $\mathscr{R}_j$ 是互不相交的，可以判定 x 属于类 j. 通过准则 δ，全部期望误判费用为

$$\mathrm{ECM} = \sum_{i=1}^{g}\left(\pi_i \sum_{j=1}^{g} c_{ij} \int_{\mathscr{R}_j} f_i(x)\mathrm{d}x\right). \tag{3-8}$$

其中 c_{ij} 为来自类 i 的观测被误判为 j 类的费用；π_i 为类 i 的先验概率；$\int_{\mathscr{R}_j} f_i(x)\mathrm{d}x$ 为在准则 δ 下，将第 i 类的观测误判为第 j 类的概率.

当密度 f_j 已知时，最优解是显然的，准则 δ^* 使得

$$\mathscr{R}_j = \left\{x: \sum_{l=1,l\neq i}^{g} \pi_l c_{lj} f_l(x) < \sum_{l=1,l\neq j}^{g} \pi_l c_{li} f_l(x), \forall\, i \neq j\right\}. \tag{3-9}$$

当 $g = 2$，π_i，c_{ij} 为常数时，$\mathscr{R}_j$ 可以简化成

$$\mathscr{R}_j = \{x; f_i(x) < f_j(x)\}. \tag{3-10}$$

上式恰好是基于似然原理下的解.

当密度 f_j 的形式是已知的，只是含有未知参数时，训练样本可以被用来估计这些未知参数，用估计量替代相应的参数后仍然可以应用最优准则 δ^*. 例如著名的费希尔线性判别准则，它就是在 $g = 2$，f_j 是具有未知均值和相同的未知方差正态密度条件下通过似然原理式(3-10)获得的.

当密度 f_j 未知时，人们不得不采用非参数方法. 为了克服非参数高维密度估计过程中维数的限制，人们可以基于训练样本利用 PPDE 方法估计密度 f_j，然后利用该密度估计和式(3-9)中的最优准则，这便导出了 PP 判决或聚类准则(PPC). 波兹豪(Polzehl, 1995)讨论了 PPC，他认为最好采用一不同的 PP 指标，使得估计 f_j 时，它可以极小化式(3-8)的 ECM. 换一个角度讲，就是在 PPDE 方法的第二个步骤中用下面指标代替式(3-7)中的指标：

$$I(\boldsymbol{\alpha}) = -\mathrm{ECM} = -\sum_{i=1}^{g}\left(\pi_i \sum_{j=1}^{g} c_{ij} \int_{\mathscr{R}_j(\boldsymbol{\alpha})} \hat{f}_i^{(k-1)}(x)\mathrm{d}x\right),$$

其中 $\hat{f}_i^{(k-1)}(x)$ 是密度 f_i 前一步的估计(相当于 PPDE 中的 $g^{(k-1)}$)，并且

$$\mathscr{R}_j(\boldsymbol{\alpha}) = \left\{x; \sum_{l=1}^{g} \pi_l (c_{lj} - c_{li}) \hat{f}_l^{(k-1)}(x) \frac{\hat{f}_{l,\hat{\boldsymbol{\alpha}}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}^{\mathrm{T}}x)}{\hat{f}_{l,\hat{\boldsymbol{\alpha}}}^{(k-1)}(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}x)} < 0, \forall\, i \neq j\right\},$$

其中 $\hat{f}_{l,\hat{\boldsymbol{\alpha}}}$ 是基于 $Z_1 = \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}X_1, \cdots, Z_n = \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}X_n$ 的边缘密度估计量，$\hat{f}_{l,\hat{\boldsymbol{\alpha}}}^{(k-1)}$ 是基于来自 $\hat{f}_l^{(k-1)}$ 的蒙特卡罗样本在方向 $\boldsymbol{\alpha}$ 投影的边缘密度估计.

处理判别分析的另外一种方式是把聚类问题看成是一个回归问题，其中响应变量 Y 是一个属性变量，它仅取 g 个可能值. 首先可以对

$$E(I(Y = j) \mid X = x) \qquad (j = 1, 2, \cdots, g)$$

进行 PPR 拟合，如果 $E(I(Y = j) \mid X = x)$ 的 PPR 估计在 $j = i$ 处达到最大值，则将观测值 x 归于第 i 类. 这与逻辑斯蒂(logistic)判别的思想是相同的.

3.7 交互式投影寻踪

交互式投影寻踪是将机械 PP 和手工 PP 的优点组合在一起的一种企图，因为人们在寻找最优投影方向过程中常常会有一些新的体会，这就需要交互式投影寻踪方式将这些体会应用上去. 这种企图最早出现在软件 Xgobi 中，该软件最早开发于 1991 年，是一种用于观察高维数据的数据可视化系统，其中包括 PP 以及其他一些非常好的图形化数据分析工具.

弗莱斯切，劳德和孙嘉阳(1998) 所提出的交互式动态投影寻踪 pp(·) 函数是朝着同一个方向的新的发展. 它是一个 Splus 函数，运行过程中可动态加载一些用 C 语言和 Fortran 语言编写的用于处理一维和二维 PP 的算法，它同时也提供了基于弗里德曼(1987) 指标的 P 值计算. 这里不再介绍.

下面举一个将 pp 函数应用于真实数据的例子.

例 3 橄榄球是美国人生活的一个重要部分. 对任何一个球队来说，非常重要的一个方面是开场队员的体质特征和表现能力. 因此，人们常常有兴趣去寻找一个好的判别准则，基于该准则以及一些(主要是体质) 相依变量和不同的场上位置，对每一个队员进行分类. 假设研究者不认识队员，通过散布分析，可以发现在每个不同的球位，开场队员和非开场队员的散布中是否存在合理的分组. 这对于确定基于可提供的数据所获得的判别准则的质量，以及对运动员训练中应该考虑的其他因素提供建议是有帮助的. 当数据的维数较高时，同样会出现维数灾难问题. 为了使得在所要找的方向上开场队员和非开场队员能够有所区别，在使用交互式投影寻踪 pp 函数时，另外附加了一些判别和散布准则. 数据集包括场上 17 个位置 1700 个球员的体质特征和表现方面的度量. 另外，也得到了每个队员在球队中是否是开场队员方面的信息，这是一个巨型的数据集，并且其中包含许多丢失数据. 首先对丢失数据进行了适当的处理，然后利用 pp 函数来寻找一个方向，使得通过一个二项分布将开场队员与非开场队员分开，对于大多数场上位置来说，通过位置、尖峰及合理的投影，可以做到这一点.

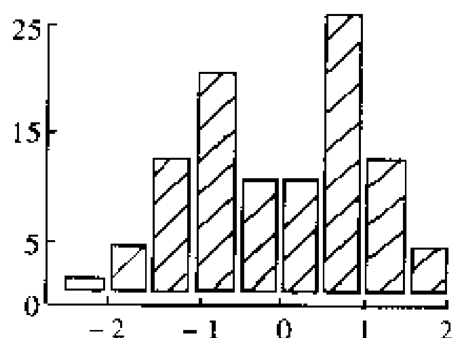


图 3-1

图 3-1 给出了位置 3 在最优投影方向上的直方图.

投影寻踪通过数据的线性投影来寻找数据集的有意义的结构，PP，PPC(或 PPDA)，PPDE 和 PPR 的一个共同特点是利用算法分步骤地在低维投影空间上极大化一个 PP 指标，这些指标对某个特定的结构是敏感的.

投影寻踪属于现代统计计算技术，随着统计软件的开发，它已经成为数据分析的有力工具，与其他现代数据分析技术一样，它也将会与那些简单而基本的数据分析技术结合在一起被广泛地使用.

4 自助法及其置信区间

4.1 自 助 法

随着计算机工业日新月异的发展,由美国统计学家埃弗朗在1979年(文献[1])提出的、基于"以计算替代理论公式推导"之思想的自助法(bootstrap)不断地发展、完善,已成为目前应用最为广泛的统计推断方法之一.

设 $\boldsymbol{X}$(通常为一向量或矩阵)为从一统计模型或母体 P 得来的样本.假定需要对 P 的某一特征(参数)θ 作推断.为方便起见设 θ 为一未知实数,根据已观察到的 $\boldsymbol{X}$,统计推断通常是通过基于 θ 的一个估计量 $\hat{\theta}=\hat{\theta}(\boldsymbol{X})$ 来进行的.例如,假设 $\hat{\theta}-\theta$ 之分布函数为已知,则 θ 的一个 $(1-2\alpha)$ 置信区间为 $(\hat{\theta}-c_{1-\alpha},\hat{\theta}-c_{\alpha})$,其中 c_{α} 为 $\hat{\theta}-\theta$ 分布的 α 分位数.

然而,在实际应用中 $\hat{\theta}-\theta$ 之分布常常是未知的.一个最简单的例子是 $X=(X_1,X_2,\cdots,X_n)$,X_i 为独立同分布,θ 为母体均值,$\hat{\theta}=\bar{X}$ 为样本均值.关于 $\bar{X}-\theta$ 的分布,只知道其均值为0,方差为 σ^2/n,σ^2 为 X_1 之方差.

在 $\hat{\theta}-\theta$ 之分布为未知的情形下如何来进行统计推断呢?一个常用的方法是先导出 $\hat{\theta}-\theta$ 之分布的一个理论公式 H(例如用正态逼近方法).理论公式 H 通常仍带有未知参数,故需要对其进行估计.记估计后的理论公式为 $\hat{H}$,则对 θ 的统计推断可通过 $\hat{H}$ 来进行.例如 θ 的置信区间可以是 $(\hat{\theta}-\hat{c}_{1-\alpha},\hat{\theta}-\hat{c}_{\alpha})$,其中 $\hat{c}_{\alpha}$ 为 $\hat{H}$ 的 α 分位数.

运用自助法,可以用大量的计算来取代以上提到的理论公式的推导.所以它在 $\hat{\theta}-\theta$ 分布之理论推导非常困难或繁琐的情形下显示出其优越性.

为介绍自助法,先考虑一个不切合实际的情形:假定可以从母体 P 中产生独立样本 $\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_B$,$B$ 为一很大的正整数.由于每个 $\hat{\theta}_b=\hat{\theta}(\boldsymbol{X}_b)$ 与 $\hat{\theta}=\hat{\theta}(\boldsymbol{X})$ 为独立同分布,$b=1,2,\cdots,B$,$\hat{\theta}$ 之分布可以在数值上用 $\hat{\theta}_1,\hat{\theta}_2,\cdots,\hat{\theta}_B$ 来刻画.由大数定律知,这样的刻画当 B 充分大时是相当准确的.注意到用此方法不需任何理论推导.

如何克服从母体 P 中产生独立样本这样一个不切实际的假定呢?根据已有样本,设 $\hat{P}$ 为 P 的一个估计.从 $\hat{P}$ 中产生独立样本 $\boldsymbol{X}_1^*,\boldsymbol{X}_2^*,\cdots,\boldsymbol{X}_B^*$ 为切实可行的.用 $\hat{\theta}_b^*=\hat{\theta}(\boldsymbol{X}_b^*)$,$b=1,2,\cdots,B$,来进行统计推断,即为自助法的基本思想.当然,$\hat{P}$ 与 P 不一样,$\hat{\theta}$ 与 $\hat{\theta}_b^*$ 不独立,所以用此方法不一定正确.20年来统计学家们做了大量

工作来验证自助法在各种场合下的正确性与准确性(见文献[16],[17]).

下面仍以估计 $\hat{\theta}-\theta$ 之分布为例加以说明. 由于 $H(t)=P(\hat{\theta}-\theta\leqslant t)$, 故其自助估计(bootstrap estimation)为

$$\hat{H}(t)=P_*(\hat{\theta}^*-\hat{\theta}\leqslant t). \tag{4-1}$$

注意到 $\hat{H}(t)$ 与 $H(t)$ 之区别在于: θ 被换成 $\hat{\theta}$, $\hat{\theta}$ 被换成 $\hat{\theta}^*$, P 被换成 P_* (给定 $\boldsymbol{X}$ 的条件分布, 相对于产生 $\boldsymbol{X}^*$ 的随机性). 事实上, $\hat{H}(t)$ 为

$$\hat{H}_B(t)=\frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}I(\hat{\theta}_b^*-\hat{\theta}\leqslant t) \tag{4-2}$$

的理论极限($B\to\infty$), 而 $\hat{H}_B(t)$ 为基于 $\hat{\theta}_b^*$ $(b=1,2,\cdots,B)$ 的某种经验分布. 其中 $I(A)$ 为 A 的示性函数. 在很多场合下, 当样本量 $n\to\infty$ 时,

$$\sup_t|\hat{H}(t)-H(t)|\to 0 \qquad (\text{a.s.}). \tag{4-3}$$

关于式(4-3)的收敛速度已有文献论述.

4.2 自助法置信区间

在本节与下两节中, 假定 $\boldsymbol{X}=(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_n)$, $\boldsymbol{X}$ 为独立同分布 d 维随机向量, 母体 P 即为 $\boldsymbol{X}_1$ 的分布函数 F. 设 F 的估计为经验分布函数 $\hat{F}(=\hat{P})$. 注意到从 $\hat{F}$ 中产生 $\boldsymbol{X}^*=(\boldsymbol{X}_1^*,\boldsymbol{X}_2^*,\cdots,\boldsymbol{X}_n^*)$ 相当于从 $\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\cdots,\boldsymbol{X}_n$ 中产生一组简单随机有放回的样本.

设 θ 为与 F 有关的一个实参数. 下面介绍在这种假设条件下构造置信下限的几种方法(构造 θ 的置信上限或区间可类似地进行).

4.2.1 自助分位数法

假定 $\hat{\theta}=\hat{\theta}(\boldsymbol{X})$ 为 θ 的估计, $\hat{\theta}^*=\hat{\theta}(\boldsymbol{X}^*)$, 则

$$K(x)=P_*(\hat{\theta}^*\leqslant x), \tag{4-4}$$

其中 P_* 为 $\boldsymbol{X}^*$ 的条件分布(给定 $\boldsymbol{X}$). 注意到 $K(x)$ 为

$$K_B(x)=\frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}I(\hat{\theta}_b^*\leqslant x)$$

的极限形式. 对于一给定的 $\alpha\in(0,\frac{1}{2})$, **自助分位数法**给出以下 θ 的置信下限:

$$\underline{\theta}_{BP}=K^{-1}(\alpha), \tag{4-5}$$

其中 $K^{-1}(\alpha)=\inf\{x:K(x)\geqslant\alpha\}$ 为 K 之 α 分位数. 在实际应用中, $K^{-1}(\alpha)$ 可换成 $K_B^{-1}(\alpha)$, B 为一正整数(根据埃弗朗的推荐, $B=1000$ 或更大).

若 $\underline{\theta}=\underline{\theta}(\boldsymbol{X})$ 为 θ 的 $(1-\alpha)$ 置信下限, 则要求

$$P(\underline{\theta}(X) \leqslant \theta) = 1 - \alpha \qquad (\forall\, P) \tag{4-6}$$

成立.在何种情形下 θ_{BP} 满足式(4-6)呢?埃弗朗认为,假定存在一单调增函数 φ,使得

$$P(\hat{\varphi} - \varphi \leqslant x) = \Phi(x) \qquad (\forall\, F) \tag{4-7}$$

成立(包括 $F = \hat{F}$ 的情形),其中 $\hat{\varphi} = \varphi(\hat{\theta})$;$\varphi = \varphi(\theta)$;$\Phi$ 为标准正态分布函数.在假定式(4-7)成立的条件下,可验证

$$\theta_{E} = \varphi^{-1}(\hat{\varphi} + Z_{\alpha})$$

满足式(4-6),其中 $Z_{\alpha} = \Phi^{-1}(\alpha)$.令

$$W = \varphi(\underline{\theta}_{BP}) - \hat{\varphi}.$$

由于当 $F = \hat{F}$ 时式(4-7)也成立,故

$$\Phi(W) = P_{*}(\hat{\varphi}^{*} - \hat{\varphi} \leqslant W) = P_{*}(\hat{\theta}^{*} \leqslant \theta_{BP}) = \alpha,$$

其中 $\hat{\varphi}^{*} = \varphi(\hat{\theta}^{*})$.上式由 $\underline{\theta}_{BP}$ 之定义得出,故有

$$W = Z_{\alpha} = \Phi^{-1}(\alpha),$$

则

$$\theta_{BP} = \varphi^{-1}(\hat{\varphi} + Z_{\alpha}) = \theta_{E}.$$

因此,在假定式(4-7)成立的条件下,$\underline{\theta}_{BP}$ 满足式(4-6).若式(4-7)仅在 n 很大时近似成立,则 $\underline{\theta}_{BP}$ 为一近似的$(1-\alpha)$置信下限.

在假定式(4-7)成立的条件下,θ_{BP} 与 $\underline{\theta}_{E}$ 是一样的.$\underline{\theta}_{E}$ 的计算需要知道 φ(理论推导),而 $\underline{\theta}_{BP}$ 的计算需要计算 $\hat{\theta}_{b}^{*}$,$b = 1,2,\cdots,B$.这进一步说明了自助法是一种以计算替代理论推导的方法.

4.2.2　修正偏度后自助分位数法

在假定式(4-7)成立的条件下,

$$P(\hat{\theta} \leqslant \theta) = P(\hat{\theta} \geqslant \theta) = \frac{1}{2},$$

即 $\hat{\theta}$ 在某种意义下是无偏估计.这在很多情况下是不成立的.若以假定

$$P(\hat{\varphi} - \varphi + z_{0} \leqslant x) = \Phi(x) \tag{4-8}$$

来替代假定式(4-7),其中 z_0 为刻画偏度的参数,则上面提到的自助分位数法要作恰当的偏度修正.

先假定 z_0 为已知数,则偏度修正后的自助分位数法给出以下 θ 的$(1-\alpha)$置信下限:

$$\theta_{BC} = K^{-1}(\Phi(z_{\alpha} + 2z_{0})), \tag{4-9}$$

其中 $K(x)$ 由式(4-4)给出.若 $z_0 = 0$,则 $\underline{\theta}_{BC} = \theta_{BP}$(见式(4-5)).若 $z_0 \neq 0$,则 $\underline{\theta}_{BC}$ 不是其自助分布 $K(x)$ 的 α 分位数,而是其 $\Phi(z_{\alpha} + 2z_{0})$ 分位数.注意到计算 $\underline{\theta}_{BC}$ 仍不

需知道 φ.

若知道式(4-8)中的 φ,则

$$\underline{\theta}_E = \varphi^{-1}(\hat{\varphi} + z_\alpha + z_0) \tag{4-10}$$

满足式(4-6).下面来证明 $\underline{\theta}_{BC} = \underline{\theta}_E$.

由假定,式(4-8)在 F 为任何分布时都成立(包括 $F = \hat{F}$),故有

$$\begin{aligned} 1 - \alpha &= \Phi(-z_\alpha) \\ &= \Phi(\hat{\varphi} - \varphi(\underline{\theta}_E) + z_0) \\ &= P(\hat{\varphi}^* - \hat{\varphi} \leqslant \hat{\varphi} - \varphi(\underline{\theta}_E)) \\ &= P_*(\hat{\theta}^* \leqslant \varphi^{-1}(\hat{\varphi} - z_\alpha - z_0)). \end{aligned}$$

这证明了

$$\varphi^{-1}(\hat{\varphi} - z_\alpha - z_0) = K^{-1}(1-\alpha).$$

由于 α 是任意的,故

$$K^{-1}(x) = \varphi^{-1}(\hat{\varphi} + \Phi^{-1}(x) - z_0) \qquad (0 < x < 1),$$

由 $\underline{\theta}_E$ 的定义即得式(4-10).

当 z_0 为未知时,从假定式(4-8),得

$$K(\hat{\theta}) = P_*(\hat{\varphi}^* - \hat{\varphi} + z_0 \leqslant z_0) = \Phi(z_0).$$

故有

$$z_0 = \Phi^{-1}(K(\hat{\theta})).$$

将上式代入式(4-9),即可得 z_0 未知时的修正偏度后的自助分位数置信下限.注意到,

$$z_0 = \Phi^{-1}(K(\hat{\theta})) = 0,$$

当且仅当 $K(\hat{\theta}) = \frac{1}{2}$ 时成立.即 $\underline{\theta}_{BC} = \underline{\theta}_{BP}$ 当且仅当 $\hat{\theta}$ 为 $K(x)$ 的中位数(或 $\hat{\theta}_1^*$, $\hat{\theta}_2^*, \cdots, \hat{\theta}_B^*$ 的中位数)时成立.

当然,若假定式(4-8)不成立,则 $\underline{\theta}_{BC}$ 也可能不是一个好的置信下限.埃弗朗(1987)考虑了一个比式(4-8)更弱的假定,并提出了一个改进 $\underline{\theta}_{BC}$ 的方法.但是,此方法的应用需要进行一些可能很复杂的推导.因此,其应用有局限性.这里不作详细介绍.

4.2.3　自助嫁接法

若 $H(x) = P(\hat{\theta} - \theta \leqslant x)$ 为已知,则

$$\underline{\theta}_E = \hat{\theta} - H^{-1}(1-\alpha)$$

为满足式(4-6)的置信下限.由式(4-3)可知,在 $H(t)$ 未知时,可用式(4-1)的自助估计 $\hat{H}(t)$(或式(4-2)的 $\hat{H}_B(t)$)来代替 $H(t)$,得到

$$\theta_{HB} = \hat{\theta} - \hat{H}_B^{-1}(1-\alpha). \tag{4-11}$$

此方法称为自助嫁接法,因为 $\hat{H}^{-1}(t)$ 不是 $\hat{\theta}-\theta$ 分布的分位数.

若 $\bar{\theta}_{BP} = K^{-1}(1-\alpha)$ 为用自助分位数法而得的 θ 的 $(1-\alpha)$ 置信上限,则不难推出

$$\theta_{HB} = 2\hat{\theta} - \bar{\theta}_{BP}.$$

4.2.4 自助法-t 方法

设 v 为 $\hat{\theta}$ 的方差估计,令

$$t(X,\theta) = \frac{\hat{\theta}-\theta}{\sqrt{v}},$$

通常称 $t(X,\theta)$ 为 t 统计量.若用 $t(X,\theta)$ 代替4.2.3小节中的 $\hat{\theta}-\theta$,则所得的置信下限称为**自助法-t 置信下限**.

具体地说,令

$$\hat{G}(x) = P_*(t(X^*,\hat{\theta}) \leqslant x)$$

为

$$G(x) = P(t(X,\theta) \leqslant x)$$

的自助估计,其中

$$t(X^*,\hat{\theta}) = \frac{\hat{\theta}^* - \hat{\theta}}{\sqrt{v^*}},$$

其中 v^* 为 v 的自助法的类似物,则自助法-t 置信下限为

$$\underline{\theta}_{BT} = \hat{\theta} - \sqrt{v}\hat{G}^{-1}(1-\alpha). \tag{4-12}$$

注意到,此方法需要方差估计 v,这在4.2.1～4.2.3小节的方法中是没有这要求的.有了方差估计 v,可用基于正态逼近的置信下限

$$\underline{\theta}_N = \hat{\theta} - \sqrt{v}z_{1-\alpha}. \tag{4-13}$$

这是非自助法中最简单的方法.

4.3 自助法置信区间的精度

在实际应用中,假定式(4-7)或式(4-8)只在极限($n\to\infty$)情况下成立,则所有的自助法的置信区间都是近似$(1-\alpha)$水平置信区间,即式(4-6)在 $n\to\infty$ 时成立.注意到,用正态逼近得到的 $\underline{\theta}_N$(式(4-13))也是近似的置信下限.因此可用 $P(\underline{\theta} \leqslant \theta)$ 收敛到$(1-\alpha)$的速度来刻画一个置信下限 $\underline{\theta}$ 的精度.称一个近似$(1-\alpha)$置信区域 $C(X)$ 具有 K 阶精度,当且仅当

$$P(\theta \in C(X)) = 1-\alpha+o(n^{-K/2}) \qquad (K=1,2,\cdots;n\to\infty). \tag{4-14}$$

下面讨论在一个特殊的但有广泛应用的场合下自助法的置信区间的精度.

设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为独立同分布 d 维随机向量,

$$\mu = EX_1, \quad \Sigma = \mathrm{var}(X_1),$$

$$\theta = g(\mu), \quad \widehat{\theta} = g(\overline{X}),$$

其中 $\overline{X}$ 为 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的均值, g 为一连续可微函数.

令 $\nabla g(x)$ 为 g 在 x 点的梯度行向量,则 $\widehat{\theta}$ 的一个方差估计为

$$v = \frac{\nabla g(\overline{X}) S^2 [\nabla g(\overline{X})]^{\mathrm{T}}}{n},$$

其中

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})(X_i - \overline{X})^{\mathrm{T}}}{n};$$

A^{T} 为 A 的转置. 令

$$t(X, \theta) = \frac{(\widehat{\theta} - \theta)}{\sqrt{v}}.$$

若 $G(x) = P(t(X, \theta) \leqslant x)$ 为已知,则 θ 的 $(1-\alpha)$ 置信下限为

$$\theta_{\mathrm{E}} = \widehat{\theta} - \sqrt{v} G^{-1}(1-\alpha). \tag{4-15}$$

当然, θ_{E} 没有应用价值,因为 G 通常是未知的.

假设存在与 F 有关的多项式 $q_j(x, F), j = 1, 2, \cdots$ 使得

$$G^{-1}(t) = z_t + \frac{q_1(z_t, F)}{\sqrt{n}} + \frac{q_2(z_t, F)}{n} + o\left(\frac{1}{n}\right), \tag{4-16}$$

其中 $z_t = \Phi^{-1}(t)$. 式(4-16)称为**科尼什-费希尔(Cornish-Fisher)展开式**. 它是以下称为埃尔沃思(Edgeworth)展开式的逆展开式(见文献[16]):

$$G(x) = \Phi(x) - \left(\frac{q_1(x, F)}{\sqrt{n}} + \frac{q_3(x, F)}{n}\right)\Phi'(x) + o\left(\frac{1}{n}\right), \tag{4-17}$$

其中 $\Phi'(x)$ 为 Φ 的导数. 令

$$\widehat{G}(x) = P_*(t(X^*, \widehat{\theta}) \leqslant x)$$

为 G 的自助估计. 若在一些条件下(见文献[16]), $\widehat{G}$ 满足式(4-16)(以 $\widehat{F}$ 换 F),则自助法-t 置信下限式(4-12)满足

$$\theta_{BT} = \widehat{\theta} - \sqrt{v}\left(z_{1-\alpha} + \sum_{j=1}^{2} \frac{q_j(z_{1-\alpha}, \widehat{F})}{n^{j/2}} + o\left(\frac{1}{n}\right)\right) \quad (\text{a.s.}). \tag{4-18}$$

在一些条件下,

$$q_j(x, \widehat{F}) - q_j(x, F) = o_p\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right).$$

故由式(4-15)、式(4-16)和式(4-18),得

$$\theta_{BT} - \underline{\theta}_{E} = o_p\left(\frac{1}{\sqrt{n^3}}\right), \tag{4-19}$$

从而

$$\begin{aligned}
P(\theta_{BT} \leqslant \theta) &= P\left(\frac{\hat{\theta}-\theta}{\sqrt{v}} \leqslant \hat{G}^{-1}(1-\alpha)\right) \\
&= P\left(\frac{\hat{\theta}-\theta}{\sqrt{v}} \leqslant z_{1-\alpha} + \sum_{j=1}^{2} \frac{q_j(z_{1-\alpha}\hat{F})}{n^{j/2}}\right) + o\left(\frac{1}{n}\right) \\
&= P\left(\frac{\hat{\theta}-\theta}{\sqrt{v}} \leqslant z_{1-\alpha} + \sum_{j=1}^{2} \frac{q_j(z_{1-\alpha}, F)}{n^{j/2}}\right) + \frac{\psi(z_{1-\alpha})}{n} + o\left(\frac{1}{n}\right) \\
&= 1 - \alpha + \frac{\psi(z_{1-\alpha})\Phi'(z_{1-\alpha})}{n} + o\left(\frac{1}{n}\right),
\end{aligned} \tag{4-20}$$

其中 $\psi(x)$ 是一个多项式(系数与 F 有关). 上述式(4-19)、式(4-20) 的证明详见文献[16].

式(4-20) 证明了自助法 -t 置信下限具有二阶精度. 当然,自助法 -t 置信上限和以置信上、下限为端点的自助法 -t 置信区间也都具有二阶精度.

下面讨论用自助嫁接法得出的式(4-11). 令

$$\tilde{H}(x) = P_*\left(\frac{(\hat{\theta}-\theta)}{\sqrt{v}} \leqslant x\right).$$

假设 $\tilde{H}$ 也有类似式(4-16) 的展开式

$$\tilde{H}^{-1}(t) = z_t + \frac{\tilde{q}_1(z_t, \hat{F})}{\sqrt{n}} + \frac{\tilde{q}_2(z_t, \hat{F})}{n} + o\left(\frac{1}{n}\right) \quad (\text{a.s.}),$$

则

$$\begin{aligned}
\underline{\theta}_{HB} &= \hat{\theta} - \sqrt{v}\tilde{H}^{-1}(1-\alpha) \\
&= \hat{\theta} - \sqrt{v}\left(Z_{1-\alpha} + \sum_{j=1}^{2} \frac{\tilde{q}_j(z_{1-\alpha}, \hat{F})}{n^{j/2}} + o\left(\frac{1}{n}\right)\right) \qquad (\text{a.s.}).
\end{aligned} \tag{4-21}$$

由式(4-21)、式(4-15),得

$$\theta_{HB} - \underline{\theta}_{E} = o_P\left(\frac{1}{n}\right). \tag{4-22}$$

比较式(4-19) 与式(4-22) 可知,$\underline{\theta}_{BT}$ 比 $\underline{\theta}_{HB}$ 更为接近理想的置信下限 $\underline{\theta}_{E}$.

类似于式(4-20),可以证明(见文献[16]):

$$\begin{aligned}
P(\underline{\theta}_{HB} \leqslant \theta) &= P\left(\frac{\hat{\theta}-\theta}{\sqrt{v}} \leqslant \tilde{H}^{-1}(1-\alpha)\right) \\
&= P\left(\frac{\hat{\theta}-\theta}{\sqrt{v}} \leqslant z_{1-\alpha} + \sum_{j=1}^{2} \frac{\tilde{q}_j(z_{1-\alpha}, \hat{F})}{n^{j/2}}\right) + o\left(\frac{1}{n}\right)
\end{aligned}$$

$$= P\left(\frac{\hat{\theta}-\theta}{\sqrt{v}} \leqslant z_{1-\alpha} + \sum_{j=1}^{2} \frac{\tilde{q}_j(z_{1-\alpha}, \hat{F})}{n^{j/2}}\right) + o\left(\frac{1}{n}\right)$$

$$= 1 - \alpha + \frac{\tilde{\psi}(z_{1-\alpha}) + \Phi'(z_{1-\alpha})}{n} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right), \qquad (4\text{-}23)$$

其中 $\tilde{\psi}(x)$ 为一个偶多项式，由于 $\tilde{\psi} \neq 0$，故 $\underline{\theta}_{HB}$ 仅具有一阶精度.

同样，自助嫁接法的置信上限 $\overline{\theta}_{HB}$ 也是具有一阶精度.

然而，若用 $(\underline{\theta}_{HB}, \overline{\theta}_{HB})$ 作置信区间，则它具有二阶精度. 这是因为

$$P(\underline{\theta}_{HB} \leqslant \theta \leqslant \overline{\theta}_{HB}) = P(\theta \leqslant \overline{\theta}_{HB}) - P(\theta < \underline{\theta}_{HB})$$

$$= 1 - \alpha + \frac{\tilde{\psi}(z_{1-\alpha})\Phi'(z_{1-\alpha})}{\sqrt{n}} -$$

$$\alpha - \frac{\tilde{\psi}(z_\alpha)\Phi'(z_\alpha)}{\sqrt{n}} + o\left(\frac{1}{n}\right)$$

$$= 1 - 2\alpha + o(n^{-1}).$$

由于 $z_{1-\alpha} = -z_\alpha$ 及 $\tilde{\psi}, \Phi'$ 为偶函数，因此 $(\underline{\theta}_{HB}, \overline{\theta}_{HB})$ 与 $(\underline{\theta}_{BT}, \overline{\theta}_{BT})$ 一样精确.

对于自助分位数法，从式(4-5)得

$$\underline{\theta}_{BP} = \hat{\theta} + \hat{H}^{-1}(\alpha).$$

由 $\underline{\theta}_{HB} = \hat{\theta} - \hat{H}^{-1}(1-\alpha)$ 得到，若

$$\frac{\hat{H}^{-1}(\alpha)}{\hat{H}^{-1}(1-\alpha)} \to -1,$$

则 $\underline{\theta}_{HB}$ 与 $\underline{\theta}_{BP}$ 具有同样的性质，即 $\underline{\theta}_{BP}$ 具有一阶精度.

再来考虑修正偏度后自助分位数法. 由埃奇沃思展开式得

$$K(\hat{\theta}) = \tilde{H}(0) = \Phi(0) + \frac{\tilde{q}(0, \hat{F})\Phi'(0)}{\sqrt{n}} + o_P\left(\frac{1}{n}\right),$$

其中 $\tilde{q}$ 为一函数，令 $\tilde{\alpha}_n = \Phi(z_\alpha + 2z_0)$，$z_0 = \Phi^{-1}(K(\hat{\theta}))$，则

$$\tilde{\alpha}_n = \alpha + \frac{2\tilde{q}(0, \hat{F})\Phi'(z_\alpha)}{\sqrt{n}} + o_P\left(\frac{1}{n}\right).$$

利用 $\tilde{H}^{-1}$ 之展开式，可得

$$\tilde{H}^{-1}(\tilde{\alpha}_n) = z_\alpha + \frac{2\tilde{q}(0, \hat{F}) + \tilde{q}_1(z_\alpha, \hat{F})}{\sqrt{n}} + o_P\left(\frac{1}{n}\right).$$

由 $\underline{\theta}_{BC}$ 的定义式(4-9)，得

$$\underline{\theta}_{BC} = K^{-1}(\tilde{\alpha}_n)$$

$$= \hat{\theta} + \sqrt{v}\left(z_\alpha + \frac{2\tilde{q}(0,\hat{F}) + q_1(z_\alpha,\hat{F})}{\sqrt{n}} + o_P\left(\frac{1}{n}\right)\right). \tag{4-24}$$

比较式(4-15)与式(4-24),得

$$\theta_{BC} - \theta_E = o_P\left(\frac{1}{n}\right).$$

从式(4-24)也可得到

$$P(\underline{\theta}_{BC} \leqslant \theta) = 1 - \alpha + \frac{\bar{\psi}(z_{1-\alpha})\Phi'(z_{1-\alpha})}{\sqrt{n}} + o\left(\frac{1}{n}\right), \tag{4-25}$$

其中 ψ 为一个偶多项式.因此,虽然$(\underline{\theta}_{BC},\bar{\theta}_{BC})$具有二阶精度,但 θ_{BC} 仍只具有一阶精度.

然而,式(4-25)中的 $\bar{\psi}(z_{1-\alpha})$ 经常在绝对值上小于式(4-23)中的 $\tilde{\psi}(z_{1-\alpha})$(见下面的例 1).因此,$\underline{\theta}_{BC}$ 是对 $\underline{\theta}_{BB}$ 和 $\underline{\theta}_{BP}$ 的部分改良.

在 4.2 节中埃弗朗(1987)提出的对 $\underline{\theta}_{BC}$ 的改进,被证明具有二阶精度(见文献[16]).

对于由非自助法推出的 $\underline{\theta}_N$(式(4-13)),由式(4-21)可得

$$\underline{\theta}_N - \theta_{HB} = o_p\left(\frac{1}{n}\right).$$

由此可见,θ_N 的性质与 θ_{HB} 的类似,它具有一阶精度.但(θ_N,θ_N)具有二阶精度.

当然,上述的结论都是在大样本($n\to\infty$)意义下得到的.对于一固定的 n 的情况,目前尚无对各种自助法的置信区间的确定结论.

例 1　设 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ 为独立同分布随机变量,

$$\theta = EX_1,$$

在一些条件(见文献[16])下,式(4-16)与式(4-17)成立,故有

$$q_1(x,F) = \frac{-r(2x^2+1)}{6},$$

$$q_2(x,F) = x\left(\frac{x^2+3}{4} - k\frac{x^2-3}{12} + 5r^2\frac{4x^2-1}{72}\right),$$

$$q_3(x,F) = x\left(\frac{x^2+3}{4} + r^2\frac{x^4+2x^2-3}{18} - k\frac{x^2-3}{12}\right),$$

其中

$$r = \frac{E(x_1-\theta)^3}{\sigma^3};$$

$$k = \frac{E(x_1-\theta)^4}{\sigma^4} - 3;$$

$$\sigma^2 = \mathrm{var}(x_1).$$

由此可得出式(4-20)中的 $\psi(x)$ 为

$$\psi(x) = \frac{x(1+2x^2)\left(k - \frac{3}{2}r^2\right)}{6};$$

式(4-23)中的 $\tilde{\psi}(x)$ 为

$$\tilde{\psi}(x) = \frac{rx^2}{2};$$

式(4-25)中的 $\bar{\psi}(x)$ 为

$$\bar{\psi}(x) = \frac{r^2(x^2+2)}{6}.$$

这样可以比较三个具有一阶精度的置信下限 $\underline{\theta}_{HB}$、$\underline{\theta}_{BC}$ 和 $\underline{\theta}_N$ 之间的差异. 令

$$e(\underline{\theta}) = P(\underline{\theta} \leqslant \theta) - (1-\alpha)$$

为置信下限 $\underline{\theta}$ 的误差率,则可证明:

$$|e(\underline{\theta}_{HB})| = |e(\underline{\theta}_N)| + C_n(z_\alpha, F) + o\left(\frac{1}{n}\right),$$

$$|e(\underline{\theta}_N)| = |e(\underline{\theta}_{BC})| + C_n(z_\alpha, F) + o\left(\frac{1}{n}\right),$$

其中

$$C_n(x, F) = |r| \frac{(x^2-1)\Phi'(x)}{6\sqrt{n}}.$$

注意到,通常 $z_\alpha^2 > 1$,故若 $r \neq 0$,则

$$C_n(z_\alpha, F) > 0,$$

即 $\underline{\theta}_N$ 比 $\underline{\theta}_{HB}$ 有更小的绝对误差率,而 $\underline{\theta}_{BC}$ 比 $\underline{\theta}_N$ 有更小的绝对误差率.

4.4 高阶精度自助法置信区间

有无可能得到一个比二阶更高精度的置信区间呢?在一定条件下,回答是肯定的. 下面先讨论非自助法. 令

$$R_n = \sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta)$$

或

$$R_n = t(\boldsymbol{X}, \theta) = \frac{\hat{\theta} - \theta}{\sqrt{n}}.$$

设 R_n 有埃奇沃思展开式

$$P(R_n \leqslant x) = \Phi(x) + \sum_{j=1}^{l} \frac{\eta_j(x)\Phi'(x)}{n^{j/2}} + o\left(\frac{1}{n^{(l+1)/2}}\right),$$

其中 η_j 为多项式,则存在多项式 ζ_j,使得

$$P\left(R_n \leqslant x - \sum_{j=1}^{l} \frac{\zeta_j(x)}{n^{j/2}}\right) = \Phi(x) + o\left(\frac{1}{n^{(l+1)/2}}\right),$$

见文献[16]. 若 $\hat{\zeta}_j$ 为 ζ_j 的一致估计,则有

$$P\left(R_n \leqslant x - \sum_{j=1}^{l} \frac{\hat{\zeta}_j(x)}{n^{j/2}}\right) = \Phi(x) + o\left(\frac{1}{n^{(l+1)/2}}\right). \tag{4-26}$$

定义

$$C_{\mathrm{EDC}}^{(l)}(X)=\left\{\theta:R_n\leqslant z_{1-\alpha}-\sum_{j=1}^{l}\frac{\hat{\zeta}_j(z_{1-\alpha})}{n^{j/2}}\right\},$$

则 $C_{\mathrm{EDC}}^{(l)}$ 为具有$(l+1)$阶精度的置信下限(或区间).但用这个方法需要推导出 ζ_j,这通常是很复杂的(见例1).当 $l=1$ 时,$C_{\mathrm{EDC}}^{(l)}$ 具有二阶精度.在4.3节中已见到用自助法-t方法构造的置信下限是有二阶精度的.

假定式(4-26)对某一 $l\geqslant 2$ 成立,能否通过自助法计算来得到与 $C_{\mathrm{EDC}}^{(l)}$ 有同样精度的区间,而不需推导 ζ_j 呢?回答是肯定的,但需要很大量的计算.下面来介绍美国统计学家贝恩(R.Beran)的结果.

令 $R_n^{(0)}=R_n$,$H_n^{(0)}$ 为$R_n^{(0)}$的分布,$\hat{H}_n^{(0)}$为$H_n^{(0)}$的自助估计(见4.2节~4.3节).令 $R_n^{(1)}=\hat{H}_n^{(0)}(R_n^{(0)})$.一般认为,用 $R_n^{(1)}$ 来构造置信区间要比用$R_n^{(0)}$好.因为 $R_n^{(1)}$ 的分布较$R_n^{(0)}$的分布更少依赖于未知分布F.例如当 $H_n^{(0)}=\hat{H}_n^{(0)}$时,$R_n^{(1)}$ 有均匀分布(设 $H_n^{(0)}$ 为连续的),不依赖于任何未知量.当然,$\hat{H}_n^{(0)}\neq H_n^{(0)}$,故 $R_n^{(1)}$ 之分布仍然是未知的.可令 $R_n^{(2)}=\hat{H}_n^{(1)}(R_n^{(1)})$,其中 $\hat{H}_n^{(1)}$ 为$H_n^{(1)}$ 的自助估计.$R_n^{(2)}$ 比 $R_n^{(1)}$ 更适合用来构造置信区间.一般地,令 $H_n^{(j)}$ 为$R_n^{(j)}$ 的分布,$\hat{H}_n^{(j)}$ 为$H_n^{(j)}$ 的自助估计,则可得到以下置信区间:

$$C_B^{(j)}(X)=\{\theta:R_n^{(j)}\leqslant(\hat{H}_n^{(j)})^{-1}(1-\alpha)\}\qquad(j=0,1,2,\cdots).$$

对于任一j,$C_B^{(j)}(X)$ 为基于 $R_n^{(j)}$ 的自助嫁接法置信区间(或区域).当 $R_n=\sqrt{n}(\hat{\theta}-\theta)$ 时,$C_B^{(j)}(X)$ 与 $C_{\mathrm{EDC}}^{(j)}(X)$ 具有同样的精度(见文献[16]).

然而,每做一次迭代,计算量将大量增加.下面以一次迭代后的 $C_B^{(1)}(X)$ 的计算为例来作说明.

令 $R_n^{(0)}=R(X,F)$,$\{X_{1b}^*,X_{2b}^*,\cdots,X_{nb}^*\}$ 为独立同分布从 $\hat{F}$中得到的自助法样本,$b=1,2,\cdots,B$,则 $\hat{H}_n^{(0)}$ 可用类似于式(4-2)的经验分布

$$\hat{H}_B^{(0)}(t)=\frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}I(R_{nb}^{(0)*}\leqslant t)$$

来近似,

$$R_{nb}^{(0)*}=R(X_{1b}^*,X_{2b}^*,\cdots,X_{nb}^*,\hat{F}).$$

对于固定的 b,令 $\hat{F}_b^*$ 为 $X_{1b}^*,X_{2b}^*,\cdots,X_{nb}^*$ 的经验分布函数,$\{X_{1bj}^{**},X_{2bj}^{**},\cdots,X_{nbj}^{**}\}$ 为独立同分布从 $\hat{F}_b^*$ 中得到的"样本",$j=1,2,\cdots,B_1$,H_b^* 为基于$R_n(X_{1bj}^{**},X_{2bj}^{**},\cdots,X_{nbj}^{**},\hat{F}_b^*)$,$j=1,2,\cdots,B_1$,的经验分布,$z_b^*=H_b^*(R_{nb}^{(0)*})$,则 $\hat{H}_n^{(1)}$ 可用

$$\hat{H}_{BB_1}^{(1)}(t)=\frac{1}{B_1}\sum_{b=1}^{B_1}I(z_b^*\leqslant t)$$

来近似,而

$$C_B^{(1)}(X) \approx \left\{\theta: R(X,F) \leqslant (\widehat{H}_B^{(0)})^{-1}((H_{BB_1}^{(1)})^{-1}(1-\alpha))\right\}.$$

注意到第二重自助法抽样是包含在第一重自助法抽样中的，即对于每个 $b=1,2,\cdots,B$，需要抽 B_1 个样本．故总共需要 BB_1 个自助法样本，作 BB_1 次计算（$R_{bb}^{(0)*}$，z_b^*）．若 $B=B_1=1000$，则 $BB_1=1\,000\,000$！以此类推，计算 $C_B^{(j)}$ 需要 $BB_1B_2\cdots B_j$ 次计算．若 $B=B_1=\cdots=1000$，则总的计算量为 $(1000)^{j+1}$．这即使在计算机大量普及的今天，恐怕也不容易办到，如果 j 很大的话．

下面介绍自助法的校正法．此方法基于以下想法：若 $C(X)$ 为一置信区间，$\pi=P(\theta\in C(X))$．假使 $\hat{\pi}$ 为 π 的一个估计，而 $(1-\alpha)>\hat{\pi}$ 的话，则应构造一个 $(1-\tilde{\alpha})$ 的置信区间，使 $(1-\tilde{\alpha})>(1-\alpha)$；反之，若 $(1-\alpha)<\hat{\pi}$，则应构造一个 $(1-\tilde{\alpha})$ 的置信区间，使 $(1-\tilde{\alpha})<(1-\alpha)$．这个以 $1-\tilde{\alpha}$ 为置信度的区间 $C_1(X)$ 称为 $C(X)$ 的校正．当然校正可以进一步进行．对 $C_1(X)$ 校正而得 $C_2(X)$，等等．

这里一个关键是如何构造 $\tilde{\alpha}$．下面以校正 $\underline{\theta}_N$（式(4-13)）为例来说明．令 $\pi=P(\underline{\theta}_N\leqslant\theta)$．其自助估计为

$$\hat{\pi}=P_*\left(\frac{1}{\sqrt{v}}(\hat{\theta}^*-\hat{\theta})\leqslant z_{1-\alpha}\right).$$

若式(4-17)在 $F=\hat{F}$ 时成立，则

$$\hat{\pi}=1-\alpha+\left(\frac{q_1(z_{1-\alpha},\hat{F})}{\sqrt{n}}+\frac{q_2(z_{1-\alpha},\hat{F})}{n}\right)\Phi'(z_{1-\alpha})+o_P\left(\frac{1}{n^{3/2}}\right).$$

令 h 为一个单调增、无界、二阶可微、定义在 $(0,1)$ 上的函数，

$$\tilde{\alpha}=1-h^{-1}(h(1-\alpha)-\delta),$$

$$\begin{aligned}\delta&=h(\hat{\pi})-h(1-\alpha)\\&=\left(\sum_{j=1}^{2}\frac{q_j(z_{1-\alpha},\hat{F})}{n^{j/2}}\right)\Phi'(z_{1-\alpha})h'(1-\alpha)+\\&\quad\frac{(q_1(z_{1-\alpha},\hat{F})\Phi'(z_{1-\alpha}))^2}{2n}h''(1-\alpha)+o_P\left(\frac{1}{n^{3/2}}\right),\end{aligned}\tag{4-27}$$

则自助法校正后的置信下限为

$$\underline{\theta}_{\mathrm{CLB}}=\hat{\theta}-\sqrt{v}z_{1-\tilde{\alpha}}.$$

由式(4-27)，得

$$1-\tilde{\alpha}=1-\alpha+\frac{q_1(z_{1-\alpha},\hat{F})\Phi'(z_{1-\alpha})}{\sqrt{n}}+o_P\left(\frac{1}{n}\right),$$

$$z_{1-\tilde{\alpha}}=z_{1-\alpha}+\frac{q_1(z_{1-\alpha},\hat{F})}{\sqrt{n}}+o_P\left(\frac{1}{n}\right).$$

故有

$$\theta_{CIB} = \hat{\theta} - \sqrt{v}\left(z_{1-\alpha} + \frac{q_1(z_{1-\alpha},\hat{F})}{\sqrt{n}} + o_P\left(\frac{1}{n}\right)\right).$$

比较上式与式(4-18),得

$$\theta_{CIB} - \theta_{BT} = o_P(n^{-3/2}).$$

由此可见,θ_{CIB}具有二阶精度.

校正一个具有K阶精度的置信区间,可得一具有$K+1$阶精度的置信区间.例如由4.3节的讨论知$(\underline{\theta}_N,\overline{\theta}_N)$是具有二阶精度的.校正$(\underline{\theta}_N,\overline{\theta}_N)$可得一具三阶精度的区间.注意到校正$(\underline{\theta}_N,\overline{\theta}_N)$不是对每一个$\underline{\theta}_N,\overline{\theta}_N$分别校正,而是对$(\underline{\theta}_N,\overline{\theta}_N)$直接校正.

自助法的应用当然不限于独立同分布场合.事实上,4.2节中的几种自助法,都可应用于一般场合.在一般场合下,一个重要的问题是如何产生自助法样本X^*.一般来说,X^*产生的过程,最好与原来样本产生的过程一致或非常类似.例如X是分层抽样的,X^*最好也是分层抽样的;若X是时间序列,则X^*最好也是时间序列.详见文献[17]中的讨论.

对应用自助法的人来说,计算代替了理论推导,但自助法并非任何场合都能用,用法也不单一,因此对理论工作者来说,需要用理论推导来证实自助法在某个场合的适用性,以及找出如何用自助法的方式(例如如何产生自助法样本).虽然类似于4.3节的结果在一些复杂的场合下已经产生(例如在回归分析中),但对于自助法尚需进一步深入进行研究.

自助法的应用也不局限于置信区间.它可用于构造方差估计,改良原来的估计量$\hat{\theta}$(例如减少偏度),估计预测精度,选择统计模型中的变量,等等.

如何有效地进行自助的计算也是一个重要的课题,特别是当使用多重自助法(4.4节)时.

最后,值得一提的是一些与自助法有关(或类似)的用计算取代推导的方法.最古老的是非参数统计方法中的Randomization方法,以及Jackknife方法,Cross-Validation方法,balanced half sample或balanced repeated replication方法,以及贝叶斯自助法或随机加权法,等等,可参见文献[17]的介绍.

参 考 文 献

1　Dempster A P, Laird N M, Rubin D B. Maximum likelihood estimation from incomplete-data via the EM algorithm (with discussion). J R Statist. Soc, 1977, B, 39: 1 ~ 38

2　Liu C, Rubin D B. The ECME algorithm: A simple extension of EM and ECM with fast monotone convergence. Biometrika, 1994, 81: 633 ~ 648

3　McKendrick A C. Applications of mathematics to medical problems. Proc Edin Math Soc, 1926, 44: 98 ~ 130

4　Meng X L. On the rate of convergence of the ECM algorithm. Ann Statist, 1994, 22: 326 ~

339

5 Meng X L, Rubin D B. Using EM to obtain asymptotic variance-covariance matrices: the SEM algorithm. J Am Statist Assoc, 1991, 86: 899 ~ 909

6 Stigler S. Citation patterns in the journals of statistics and probability. Statist, 1994, Science, 9: 94 ~ 108

7 Hastings W K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and thire applications. 1970, Biometrika, 82: 711 ~ 732

8 Metropolis N, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N, et al. Equations of state calculations by fast computing machines, J Chem Phys, 1953, 21: 1087 ~ 1091

9 Gilks W R, Richardson S, Spiegelhalter D J. Markov chain Monte Carlo in practice. New York: Chapman & Hall, 1995.

10 Huber P. Projection Pursuit (with disscussion). Ann. Statist. 1985(13): 435 ~ 475

11 Friedman J H, Tukey J. A projection pursuit algorithm for exploratory data analysis. IEEE Trans Computer, 1974, C(23): 881 ~ 889

12 Friedman J H. Exploratory projection pursuit. J Am Statist Assoc, 1987, 82: 249 ~ 266

13 Friedman J H, Stuetzle W. Projection pursuit regression. J Amer Statist Assoc, 1981, 76: 817 ~ 823

14 Sun J. Significance levels in exploratory projection pursuit. biometrika, 1991, 78: 759 ~ 769

15 Efron B. Bootstrap methods: Another look at the jackknife, Ann Statist, 1979, 7: 1 ~ 26

16 Hall P. The bootstrap and Edgeworth expansion, New York: Springer-Verlag, 1992.

17 Shao J and Tu D. The Jackknife and bootstrap. New York: Springer-Verlag, 1995.

18 Efron B. Better bootstrap confidence interval, J Amer Statist Assoc, 1987, 82: 171 ~ 200

第12篇

随机过程

编　者　刘秀芳
审校者　龚光鲁

目　录

引　言

随机过程是随时间推进的随机现象的数学抽象.

一些特殊的随机过程早已引起科学家们的注意.例如1907年前后,马尔可夫(A.A.Markov)研究过一列有特定相依性的随机变量,后人称之为马尔可夫链,又如1923年维纳(N.Wiener)给出了布朗(R.Brown)运动的数学定义.这类过程至今仍是重要的研究对象.

随机过程的一般理论的研究通常认为开始于20世纪30年代.1931年,科尔莫戈罗夫(A.N.Kolmogorov)发表了《概率论的解析方法》.1934年,辛钦(A.Ja.Khintchine)发表了《平稳过程的相关理论》,分别为马尔可夫过程和平稳随机过程奠定了理论基础.1953年,杜布(J.L.Doob)的《随机过程》一书系统而严格地叙述了随机过程的基本理论.

随机过程的强大生命力既来源于理论本身,又来源于其他数学分支与它的相互渗透,更重要的是来源于科学技术的进步和生产实践的客观要求.目前随机过程已广泛地应用于统计物理、放射性、原子反应、天体物理、化学反应、生物中的群体增长、遗传学、传染病等问题的研究之中.它对排队论、信息论、可靠性理论、经济数学、金融数学以及自动控制、无线电技术的作用更为显著.

1　随机过程的一般理论

1.1　随机过程的定义

设$(\Omega,\mathscr{F},P)$为概率空间,T为指标t的集合(通常视t为时间),如果对于每个$t\in T$,有定义在$(\Omega,\mathscr{F},P)$上的实随机变量$X(t)$与之对应,则称随机变量族$X=\{X(t),t\in T\}$为一随机过程.对随机过程研究最多的是T为实数集$\mathbf{R}=(-\infty,\infty)$的子集的情形.如果$T$为整数集$\mathbf{Z}$的子集,也称$X$为随机序列或离散时间随机过程;如果$T$是$d$维欧几里德空间$\mathbf{R}^d(d>1)$的子集,则称$X$为多参数(或多指标)随机过程.

过程X实际上是两个变元$(t,\omega)(t\in T,\omega\in\Omega)$的函数.当$t$固定时,它是一个随机变量;当$\omega$固定时,它是$t$的函数,称此函数为随机过程对应于$\omega$的**轨道**或**样本函数**.

如不限于实值情况,可将随机过程的概念推广到一般情形:

设$(\Omega,\mathscr{F},P)$为概率空间,$(E,\mathscr{E})$为任一可测空间(E为任一非空集,$\mathscr{E}$为E的某些子集组成的σ域),X为从Ω到E的映射,如果对于任意$B\in\mathscr{E}$,$\{\omega:X(\omega)\in B\}$

$\in \mathscr{F}$,则称 $X = \{X(\omega), \omega \in \Omega\}$ 为取值于 E 的**随机元**.如果$(E, \mathscr{E}) = (\mathbf{R}^d, \mathscr{B}^d)$,其中 $\mathscr{B}^d$ 为 d 维博雷尔(A. Borel)域,则取值于 E 的随机元 X 为 d 维随机向量;若$(E, \mathscr{E}) = \{\mathbf{R}^T, \mathscr{B}^T\}$,其中 $\mathbf{R}^T$ 为全体实函数 $f = \{f(t), t \in T\}$ 的集,而 $\mathscr{B}^T$ 为 $\mathbf{R}^T$ 中有限维柱集$\{f \in \mathbf{R}^T: f(t_1) \leqslant x_1, f(t_2) \leqslant x_2, \cdots, f(t_n) \leqslant x_n\}(t_i \in T, x_i \in \mathbf{R}, n \in \mathbf{N})$ 类上的最小 σ 域,则取值于 E 的随机元 X 即为上述随机过程.如对于 $t \in T$,有取值于 E 的随机元 $\boldsymbol{X}(t)$ 与之对应,则称 $X = \{\boldsymbol{X}(t), t \in T\}$ 为取值于 E 的随机过程,E 称为状态空间(或相空间).

例如,当 E 为复数空间,$\mathscr{E}$为复博雷尔域时,$\{\boldsymbol{X}(t), t \in T\}$ 就是复随机过程.当 E 为任一巴拿赫(S. Banach)空间 B 时,$\mathscr{E}$为 B 上全体连续函数生成的σ 代数,则称 $\{\boldsymbol{X}(t), t \in T\}$ 为 B 值随机过程,等等.

以下主要讨论取值于 $\mathbf{R}$ 的随机过程.

1.2　随机过程的分布及数字特征

1.2.1　随机过程的有穷维分布族

一维分布函数描述了一维随机变量取值的概率规律.对(实)随机过程 $X = \{\boldsymbol{X}(t), t \in T\}$ 起类似作用的是它的全体有穷维分布函数:

对于任意自然数 n,任意 $t_1, t_2, \cdots, t_n \in T$, $\boldsymbol{X}(t_1), \boldsymbol{X}(t_2), \cdots, \boldsymbol{X}(t_n)$的联合分布函数记为

$$F_{t_1, t_2, \cdots, t_n}(x_1, x_2, \cdots, x_n) = P(\boldsymbol{X}(t_1) \leqslant x_1, \boldsymbol{X}(t_2) \leqslant x_2, \cdots, \boldsymbol{X}(t_n) \leqslant x_n)$$
$$((x_1, x_2, \cdots, x_n) \in \mathbf{R}^n),$$

则全体联合分布函数$\{F_{t_1, t_2, \cdots, t_n}: t_1, t_2, \cdots, t_n \in T, n \in \mathbf{N}\}$ 称为 X 的**有穷维分布族**.它显然满足下列相容性条件:

1° 对于$(1,2,\cdots,n)$的任一置换$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$,

$$F_{t_1, t_2, \cdots, t_n}(x_1, x_2, \cdots, x_n) = F_{t_{\lambda_1}, t_{\lambda_2}, \cdots, t_{\lambda_n}}(x_{\lambda_1}, x_{\lambda_2}, \cdots, x_{\lambda_n}),$$

对于一切$(x_1, x_2, \cdots, x_n) \in \mathbf{R}^n$ 成立;

2° 若 $m < n$,则对于一切$(x_1, x_2, \cdots, x_m) \in \mathbf{R}^m$,

$$F_{t_1, t_2, \cdots, t_m}(x_1, x_2, \cdots, x_m) = \lim_{x_{m+1} \to +\infty, \cdots, x_n \to +\infty} F_{t_1, t_2, \cdots, t_n}(x_1, x_2, \cdots, x_n).$$

反之,有下述著名的科尔莫戈罗夫相容性定理.

定理 1　设已给 T 及一族概率分布函数:$F = \{F_{t_1, t_2, \cdots, t_n}: t_1, t_2, \cdots, t_n \in T, n \in \mathbf{N}\}$,如果它满足 1° 及 2°,则必存在概率空间$(\Omega, \mathscr{F}, P)$ 及定义于其上的随机过程 X,X 的有穷维分布族重合于 F.

从测度论的观点来看,每一随机过程 $X = \{\boldsymbol{X}(t), t \in T\}$ 在$(\mathbf{R}^T, \mathscr{B}^T)$上导出的一个概率测度 P_X,都可称为 X 的分布,它在上述柱集上的值就是

$$P(\boldsymbol{X}(t_1) \leqslant x_1, \boldsymbol{X}(t_2) \leqslant x_2, \cdots, \boldsymbol{X}(t_n) \leqslant x_n).$$

1.2.2 随机过程的均值函数

若对于任意 $t \in T$, $X(t)$ 的期望 $EX(t)$ 都存在,则称 $\{EX(t), t \in T\}$ 为随机过程的**均值函数**,记作 $\{m(t), t \in T\}$.

1.2.3 随机过程的协方差函数

若对于任意 $t \in T$, $X(t)$ 的方差都存在且有限,则称

$$R(s,t) = \mathrm{cov}(X(s), \quad X(t)) = EX(s)X(t) - m(s)m(t) \qquad (s, t \in T)$$

为随机过程 X 的**协方差函数**.特别地,$R(t,t)(t \in T)$ 为随机过程 X 的方差函数.

协方差函数 $R(s,t), s, t \in T$,是对称非负定函数,即 $R(s,t) = R(t,s)$,且对于任意 $t_1, t_2, \cdots, t_n \in T, a_1, a_2, \cdots, a_n \in \mathbf{R}$,都有 $\sum_{i,j=1}^{n} R(t_i, t_j) a_i a_j \geqslant 0$.

例 1 正态过程.

有穷维分布都是正态分布的随机过程称为**正态过程**.正如正态分布被其均值和协方差阵所确定一样,正态过程 $\{X(t), t \in T\}$ 的有穷维分布族被它的均值函数 $m(t)$ 和协方差函数 $R(s,t)$ 唯一决定,正态过程的协方差函数是正定的.如果还允许 $R(s,t)$ 可以退化,则对应的过程就包含了退化的正态过程,称为高斯(C.F. Gauss)过程.

由科尔莫戈罗夫相容性定理可知,对于任意给定的有限实值函数 $m(t), t \in T$,和对称非负定函数 $R(s,t), s, t \in T$,存在一个正态过程,这个正态过程分别以 $m(t)$ 为其均值函数,以 $R(s,t)$ 为其协方差函数.

若 $X(t) = X_1(t) + \mathrm{i}X_2(t)$ 为复值随机过程,$X_1(t)$, $X_2(t)$ 分别为其实部和虚部,则其均值函数定义为

$$m(t) = EX_1(t) + \mathrm{i}EX_2(t),$$

协方差函数定义为

$$R(s,t) = EX(s)\overline{X(t)} - EX(s)E\overline{X(t)},$$

其中 $\overline{X(t)}$ 为 $X(t)$ 的共轭复数,即 $\overline{X(t)} = X_1(t) - \mathrm{i}X_2(t)$.

1.2.4 随机过程的 k 阶矩

设 $k = r_1 + r_2 + \cdots + r_n$, $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 为自然数,若对于任意 $t_1, t_2, \cdots, t_n \in T$,有

$$E \mid X^{r_1}(t_1) X^{r_2}(t_2) \cdots X^{r_n}(t_n) \mid < \infty,$$

则称 $E(X^{r_1}(t_1) X^{r_2}(t_2) \cdots X^{r_n}(t_n))$ 为随机过程 X 的 k 阶矩.

随机过程的均值函数、协方差函数及 k 阶矩统称为随机过程的数字特征函数.有许多实际情形较容易给出随机过程的数字特征函数而难于给出有穷维分布族,而且由它可以得出随机过程的某些性质.在某些特殊情形,例如正态过程及泊松(S.D. Poisson)过程,还可以由其均值函数和协方差函数唯一决定其有穷维分布族.

1.3　随机过程的可分性与可测性

1.3.1　可分性

在随机过程的研究中，Ω 的某些重要子集并不能由事件(即 $\mathscr{F}$ 中元)经可列次集运算得到．例如，设

$$A = \{\omega : X(t,\omega) \leqslant a, \forall t \in T\} = \bigcap_{t\in T}\{X(t) \leqslant a\},$$

当指标集 T 为不可数集时，作为不可列多个事件的交 A 未必是一个事件，也谈不上它的概率．为了解决这类问题，杜布引进了随机过程可分性的概念．

设 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 为完备概率空间(即 $\mathscr{F}$ 包含任何概率为零的集的一切子集)，则称随机过程 X 关于 T 的某一可列稠集 Q **可分**，是指除了一个概率为零的集 N 外，X 在每一 $t \in T$ 处的值可以用限于 Q 的 X 在 t 附近的值来任意逼近，即任给不属于 N 的 ω，存在 $\{r_j\} \subset Q$，使 $r_j \to t$，且 $X(r_j,\omega) \to X(t,\omega)$．如果 X 关于 Q 可分，则可以证明上述的 A 为一事件，而且有 $P(A) = P\{\omega : X(r,\omega) \leqslant a, \forall r \in Q\}$．如果 X 关于 T 的任一可列稠集都可分，则称 X **完全可分**．

设 $X = \{X(t), t \in T\}$ 与 $Y = \{Y(t), t \in T\}$ 为定义在 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 上的两个随机过程，如果对于任何 $t \in T$，$P\{X(t) = Y(t)\} = 1$，则称 X 与 Y **等价**，这时 X 与 Y 有相同的有穷维分布族．

杜布证明了对于任一随机过程 $X(t), t \in T$，必存在与其等价的可分过程 Y．于是在讨论过程 X 仅与有穷维分布有关的性质时，可取一可分过程 Y 来替代 X．

如果对于任一 $t_0 \in T$，在依概率收敛的意义下有

$$\lim_{t\to t_0} X(t) = X(t_0),$$

则称过程 X 为**随机连续**的．对于随机连续的过程 X，必存在一个完全可分的过程 Y 与其等价．

1.3.2　可测性

为了研究样本函数对 t 的积分等问题，需要确定 $X(t,\omega)$ 关于两个变量 (t,ω) 的可测性．设 T 是 $\mathbf{R}$ 中某区间，$\mathscr{B}(T)$ 是 T 中全体博雷尔集所成的 σ 域 $(\mathscr{B}(T) = \mathscr{B}\cap T)$．$\mathscr{B}(T)\times\mathscr{F}$ 表示乘积 σ 域，$\mu = L \times P$ 表示勒贝格(H.L.Lebesgue)测度 L 与 P 的乘积测度，$\overline{\mathscr{B}(T)\times\mathscr{F}}$ 表示 $\mathscr{B}(T)\times\mathscr{F}$ 关于 μ 的完全化．如果对于任一实数 a，

$$\{(t,\omega) : X(t,\omega) \leqslant a\} \in \overline{\mathscr{B}(T)\times\mathscr{F}},$$

则称随机过程 X 是**可测的**；如果对于任意实数 a，

$$\{(t,\omega) : X(t,\omega) \leqslant a\} \in \mathscr{B}(T)\times\mathscr{F},$$

则称 X 为**博雷尔可测过程**．

如果过程 X 随机连续，则必存在与其等价的可测且完全可分的过程 Y．

设给定 $\mathscr{F}$ 的一个子 σ 域流 $\{\mathscr{F}_t, t \in T\}$，其中 $T = \mathbf{R}_+ = [0,\infty)$，满足：

1° 单调性　对于 $s \leqslant t, \mathscr{F}_s \subset \mathscr{F}_t \subset \mathscr{F}$；

2° 右连续性　$\mathscr{F}_s = \bigcap_{t>s} \mathscr{F}_t$；

3° 完备性　$\mathscr{F}_0$ 包含 $\mathscr{F}$ 的一切概率为零的集之子集

如果对于任一 $t \in T, X(t, \cdot) \in \mathscr{F}_t$，则称 X 为**适应过程**. 如果对于任一 $t \in T$ 及实数 a，

$$\{(s,\omega): X(s,\omega) \leqslant a, \quad s \leqslant t\} \in \mathscr{B}([0,t]) \times \mathscr{F}_t,$$

则称 X 为**循序可测过程**.

循序可测过程一定是适应的而且是博雷尔可测过程. 反之，样本函数右连续的适应过程一定是循序可测过程. 使一切样本函数右连续的适应过程都可测的 $T \times \Omega$ 上的最小 σ 域称为可选 σ 域. 关于可选 σ 域可测的过程称为**可选过程**. 进一步，使一切样本函数左连续的适应过程都可测的 $T \times \Omega$ 上的最小 σ 域称为可料 σ 域. 关于可料 σ 域可测的过程称为**可料过程**.

1.4 样本函数的性质

人们研究随机过程最感兴趣的是它的轨道性质，例如它的有界性、连续性、阶梯性等.

若过程 $\{X(t), t \in [a,b]\}$ 可分，且存在常数 $\alpha > 0, \varepsilon > 0, C \geqslant 0$，使对于任意的 $t, t + \Delta t \in [a,b]$，有

$$E \mid X(t) - X(t+\Delta t) \mid^{\alpha} \leqslant C \mid \Delta t \mid^{1+\varepsilon},$$

则过程的轨道依概率 1 在 $[a,b]$ 上一致连续.

若过程 $\{X(t), t \in [a,b]\}$ 可分、随机连续且存在常数 $p, q, r > 0, C \geqslant 0$，使对于任意的 $a \leqslant t_1 \leqslant t_2 \leqslant t_3 \leqslant b$，有

$$E \mid X(t_1) - X(t_2) \mid^{p} \mid X(t_3) - X(t_2) \mid^{q} \leqslant C(t_3 - t_1)^{1+r},$$

则过程的轨道以概率 1 无第二类间断点.

1.5 停　　时

直观上，**停时**是描述某种随机现象发生的时刻. 它是普通时间变量 t 的随机化. 例如，对于作随机游动的粒子首次达到某集 A 的时刻 τ，有

$$\tau(\omega) = \inf\{t > 0, X(t,\omega) \in A\},$$

且约定 $\inf\varnothing = \infty$，当 X 的轨道连续且 A 是一个闭集时，τ 就是一个停时. 它是一个非负随机变量，且对于任何 $t \geqslant 0, \{\tau \leqslant t\} \in \sigma(X(s), s \leqslant t)$.

一般地，设在概率空间 $(\Omega, \mathscr{F}, P)$ 中已给 $\mathscr{F}$ 的一族单调增、完备的子 σ 域族 $\{\mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$，如果对于任意 $t \geqslant 0$，总有 $\{\tau \leqslant t\} \in \mathscr{F}_t$，则称定义在 Ω 上的非负可测函数 τ（$\tau(\omega)$ 可取 ∞ 值）为 $\{\mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$ 停时. 这一定义的直观背景是：把 $\mathscr{F}_t$ 理解为到 t 为止的全部信息，一个可观测的随机现象不迟于 t 发生的这一信息应包含在 $\mathscr{F}_t$ 之中.

若 τ_1, τ_2 为停时，则 $\tau_1 + \tau_2, \tau_1 \vee \tau_2 = \max\{\tau_1, \tau_2\}, \tau_1 \wedge \tau_2 = \min\{\tau_1, \tau_2\}$ 都

是停时；

若 $\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_n,\cdots$ 为一列停时，则 $\sup\limits_{n\geq 1}\tau_n$ 是停时；

如果 $\{\mathscr{F}_t,t\geq 0\}$ 右连续，则 $\inf\limits_{n\geq 1}\tau_n,\ \overline{\lim\limits_{n\to\infty}}\tau_n,\ \underline{\lim\limits_{n\to\infty}}\tau_n$ 都是停时.

类似于 $\mathscr{F}_t$，对停时 τ 可以定义 σ 域为

$$\mathscr{F}_\tau=\{A\in\mathscr{F}_\infty:A\cap\{\tau\leq t\}\in\mathscr{F}_t,\text{对于一切 } t\geq 0 \text{ 成立}\},$$

其中 $\mathscr{F}_\infty=\sigma(\bigcup\limits_{t\geq 0}\mathscr{F}_t)$，为包含一切 $\mathscr{F}_t$ 的最小 σ 域. $\mathscr{F}_\tau$ 可理解为过程到 τ 为止的全部信息，τ 为 $\mathscr{F}_\tau$ 可测.

若 τ_1,τ_2 为停时，且 $\tau_1\leq\tau_2$，则 $\mathscr{F}_{\tau_1}\subset\mathscr{F}_{\tau_2}$.

1.6 几类特殊的随机过程

1.6.1 独立随机过程

若对于任何 $n\in\mathbf{N}$ 及 $t_1,t_2,\cdots,t_n\in T$，随机变量 $X(t_1),X(t_2),\cdots,X(t_n)$ 相互独立，则称 $\{X(t),t\in T\}$ 为**独立随机过程**.

独立随机过程 $\{X(t),t\in T\}$ 的有穷维分布族 $\{F_{t_1,t_2,\cdots,t_n}:t_1,t_2,\cdots,t_n\in T,n\in\mathbf{N}\}$ 满足

$$F_{t_1,t_2,\cdots,t_n}(x_1,x_2,\cdots,x_n)=F_{t_1}(x_1)F_{t_2}(x_2)\cdots F_{t_n}(x_n)\quad(x_1,x_2,\cdots,x_n\in\mathbf{R}),$$

其中 $F_{t_1},F_{t_2},\cdots,F_{t_n}$ 分别为 $X(t_1),X(t_2),\cdots,X(t_n)$ 的分布函数.

当 T 为可数集 $\mathbf{N}$ 时，$\{X(t),t\in\mathbf{N}\}$ 即为独立随机变量序列.

1.6.2 独立增量过程

若对于任何 $n\in\mathbf{N}$ 及 $t_1<t_2<\cdots<t_n,t_i\in T,i=1,2,\cdots,n$，随机变量 $X(t_2)-X(t_1),X(t_3)-X(t_2),\cdots,X(t_n)-X(t_{n-1})$ 相互独立，则称随机过程 $\{X(t),t\in T\}$ 为**独立增量过程**.

例2 泊松过程.

称取非负整数值的随机过程 $\{X(t),t\geq 0\}$ 为**泊松过程**，如果它满足：

1° $\{X(t),t\geq 0\}$ 是独立增量过程；

2° 对于任意 $0\leq s\leq t$，$X(t)-X(s)$ 具有参数为 $\lambda(t-s)$ 的泊松分布，即

$$P(X(t)-X(s)=k)=\frac{\lambda^k(t-s)^k}{k!}\exp\{-\lambda(t-s)\}.$$

泊松过程的样本函数具有下述性质(设过程可分)：

1° 对于任意实数 δ，使 $t\geq 0,t+\delta\geq 0$，有

$$P(X(t+\delta)\neq X(t))\leq\lambda|\delta|,$$

从而过程是随机连续的，是完全可分的，且样本函数以概率1在任意 $[0,n]$ 区间中，在 $[0,\infty)$ 中是阶梯函数.

2° 对于任意 $0\leq s<t$，

$$P(X(t) \geqslant X(s)) = 1,$$

从而样本函数以概率 1 在 $[0,\infty)$ 上不减.

3° 几乎一切样本函数都是不连续的,有跳跃点,且在跳跃点处的跃度为 1.

4° 在任一固定点 $t_0 \geqslant 0$ 上,几乎一切样本函数都是连续的.

3° 和 4° 表示,对于可分的泊松过程,以概率 1 存在流动断点,但任何 $t_0(t_0 \geqslant 0)$ 都不是固定断点.

5° 将 $X(t,\omega)$ 的跳跃点按大小次序排列

$$\tau_1(\omega) < \tau_2(\omega) < \cdots$$

则 $\tau_n - \tau_{n-1}, n \geqslant 1$,独立,同是参数为 λ 的指数分布的随机变量序列.

泊松过程是描述具有下列性质的随机事件流的数学模型:

1° 无后效性　在互不相交的时间区间内,事件发生的次数相互独立;

2° 平稳性　在 $(a, a+t]$ 时间区间内,发生 k 次事件的概率 $v_k(t)$ 只与 t 有关而不依赖于 a,且 $v_0(t)$ 不恒为 1;

3° 有限非平凡性　在有限区间 $(a, a+t]$ 中只出现有穷多个事件,即

$$\sum_{k \geqslant 0} v_k(t) = 1;$$

4° 普通性　在 $(a, a+t]$ 中出现两个或更多个事件的概率

$$\psi(t) = 1 - v_0(t) - v_1(t)$$

是关于 t 的高级无穷小量.

如果用 $X(t)$ 表示上述事件流在 $(0,t]$ 时间内发生的事件次数,则 $\{X(t), t \geqslant 0\}$ 为泊松过程.

用泊松过程可描述到某服务站的顾客流.

1.6.3　马尔可夫过程

若对于任意 $n \in \mathbf{N}$ 和 $t_1 < t_2 < \cdots < t_n < s < t$,$\{t_1, t_2, \cdots, t_n, s, t\} \subset T$,以及任意实数 $x_1, x_2, \cdots, x_n, x, y$,均有

$$P(X(t) \leqslant y \mid X(s) = x, X(t_1) = x_1, X(t_2) = x_2, \cdots, X(t_n) = x_n)$$
$$= P(X(t) \leqslant y \mid X(s) = x) \qquad \text{(a.s.)},$$

则称随机过程 $\{X(t), t \in T\}$ 为**马尔可夫过程**,并称

$$F(s, x; t, y) = P(X(t) \leqslant y \mid X(s) = x)$$

为转移概率分布函数.

马尔可夫过程的意义是:随机过程在现在时刻的状态已知的条件下,过程在 s 以后的发展与其在过去(s 以前)经历的状态无关.这一性质称为**马尔可夫性**或**无后效性**.

关于马尔可夫过程的讨论详见第 2 章.

1.6.4　二阶过程

均值和方差函数都有限的实值或复值随机过程称为**二阶过程**.

二阶过程的重要特性是它具有积分表示形式.

设 F 是可测空间$(\Lambda,\mathscr{B})$上的有限测度,如果对于每一$A\in\mathscr{B}$,有一复值随机变量 $Z(A)$ 与其对应且满足:

1° $E|Z(A)|^2<\infty$;

2° 对于任意$A_1,A_2\in\mathscr{B}$,$EZ(A_1)\overline{Z(A_2)}=F(A_1\cap A_2)$,

则称 $Z=\{Z(A),A\in\mathscr{B}\}$ 为$(\Lambda,\mathscr{B})$上的正交随机测度.定义在 Λ 上关于$\mathscr{B}$可测且关于 F 平方可积的函数全体记作$L^2(\Lambda,\mathscr{B},F)$.给定一个正交随机测度 F 及一族函数$\{f(t,\cdot):t\in T\}\subset L^2(\Lambda,\mathscr{B},F)$,就可产生一个二阶过程 $X=\{X(t),t\in T\}$,满足

$$X(t)=\int_\Lambda f(t,\lambda)Z(\mathrm{d}\lambda)\qquad(t\in T),\tag{1-1}$$

它的二阶矩为

$$EX(t)\overline{X(s)}=\int_\Lambda f(t,\lambda)\overline{f(s,\lambda)}F(\mathrm{d}\lambda).\tag{1-2}$$

反之,对于给定的二阶过程,只要它的二阶矩有上述积分表示式(1-2),就存在一正交随机测度 Z,使得过程本身有关于 Z 的积分表示式(1-1).式(1-1) 和式(1-2) 分别称为过程 X 和它的二阶矩的**谱表示**.

对于均方连续(即对于一切 $t_0\in[a,b]$,当$t\to t_0$时,$E|X(t)-X(t_0)|^2\to 0$)的实二阶过程$\{X(t),t\in[a,b]\}$,有级数展开式

$$X(t)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\psi_n(t)}{\lambda_n}\eta_n,$$

其中$\{\eta_n\}$是标准正交实随机变量序列,即

$$E\eta_n\eta_m=\delta_{n,m}(n\neq m\text{ 时为 }0,n=m\text{ 时为 }1),$$

λ_n 是积分方程 $\psi(t)=\lambda\int_a^b\Gamma(t,s)\psi(s)\mathrm{d}s$ 的特征值,ψ_n 是相应的特征函数,其中

$$\Gamma(t,s)=EX(t)X(s).$$

1.6.5 平稳过程

设$\{X(t),t\in T\}$ 的有穷维分布族为$\{F_{t_1,t_2,\cdots,t_n}:t_1,t_2,\cdots,t_n\in T,n\in\mathbf{N}\}$,若对于任意 $n\in\mathbf{N}$ 和 $\tau,t_1,t_2,\cdots,t_n,t_1+\tau,t_2+\tau,\cdots,t_n+\tau\in T$ 以及任意实数$x_1,x_2,\cdots,x_n$,均有

$$F_{t_1,t_2,\cdots,t_n}(x_1,x_2,\cdots,x_n)=F_{t_1+\tau,\cdots,t_n+\tau}(x_1,x_2,\cdots,x_n),$$

则称$\{X(t),t\in T\}$ 为**严平稳过程**或狭义平稳过程.

严平稳过程的实际意义是过程的分布规律不随时间的推移而改变.

若 $X=\{X(t),t\in T\}$ 为二阶过程,且对于任意的$\tau,s,t,s+\tau,t+\tau\in T$,均有

$$EX(s)=EX(t),\quad 且\quad R(s,t)=R(s+\tau,t+\tau),$$

则称随机过程 X 为**宽平稳过程**或广义平稳过程.可见,对于宽平稳过程,其协方差函数 $R(s,t)$ 仅与 $t-s$ 有关.

1.6.6　鞅

设 T 是 $\mathbf{R}$ 的子集，随机过程 $X=\{X(t),t\in T\}$ 是具有有限均值的函数，且关于增 σ 域流 $\{\mathscr{F}_t,t\in T\}$ 适应．若对于任何 $s<t,s,t\in T$，有

$$E(X(t)\mid\mathscr{F}_s)=X(s)\qquad(\text{a.s.}),$$

则称 X 为 $\{\mathscr{F}_t,t\in T\}$ 鞅．当 T 为可数集时称为离散时间鞅．

鞅起源于对公平赌博过程的数学描述．如果把 $X(t)$ 看做一场赌博中某一局中人在时刻 t 的本金，$\mathscr{F}_s$ 看做他到时刻 s 为止积累的经验，则鞅的性质表明，无论他在时刻 s 以后的赌博中如何利用已得的经验 $\mathscr{F}_s$，他所能期望于未来时刻 t 的本金仍然只能是 $X(s)$．这正是"公平性"的体现．

2　马尔可夫过程

2.1　马尔可夫过程概述

最简单的马尔可夫过程是离散时间可数状态马尔可夫链，由俄国数学家马尔可夫于 1907 年提出．人们在实际中常遇到具有下述特性的随机过程：在已知它现在的状态的条件下，它未来的演变规律不依赖于它以往的经历．具有这种性质的随机过程称为马尔可夫过程．例如，一个生物群体的繁衍，在已知现在群体数目的条件下，未来某时刻群体数目的概率分布与过去如何演变无关，仅与现在的数目有关．又如液体中微粒所作的不规则运动，传染病受感染的人数，原子核中自由粒子在电子层间的跳跃等都可视为马尔可夫过程．

1931 年科尔莫戈罗夫在《概率论的解析方法》中，首先将微分方程等分析方法用于此类过程的研究，奠定了它的理论基础．1948 年前后伊藤（K. Itô）在莱维（P. Lévy）及伯恩斯坦（S. N. Bernstein）等人工作的基础上，建立了随机微分方程的理论，为研究马尔可夫过程开辟了新途径．1954 年前后，费勒（W. Feller）将泛函分析中的半群方法引入马尔可夫过程的研究，邓肯（E. B. Dynkin）又赋予它概率意义．20 世纪 50 年代初，角谷静夫（S. Kakutani）和杜布等又发现了布朗运动与偏微分方程中的狄利克雷（P. G. L. Dirichlet）问题的关系，后来亨特（G. A. Hunt）又研究了相当一般的马尔可夫过程与位势的关系．目前，马尔可夫过程、马尔可夫随机场、无穷粒子马尔可夫过程、测度值分支过程（超过程）等都是正在研究或正待研究的领域．

马尔可夫过程的研究大致可分为以下几类：

(1) 离散时间马尔可夫链；

(2) 连续时间马尔可夫链；

(3) 轨道连续的马尔可夫过程；

(4) 间断型马尔可夫过程（跳过程）．

2.2 离散时间马尔可夫链

若随机过程$\{X(t),t\in T\}$的参数集T为非负整数集Z_+,状态空间E为可数集,且对于任意$0\leqslant n_1<n_2<\cdots<n_l<m,n>0,i_1,i_2,\cdots,i_l,i,j\in E,l\geqslant 1$,有

$$P(X_{n+m}=j\mid X_{n_1}=i_1,X_{n_2}=i_2,\cdots,X_{n_l}=i_l,X_m=i)$$
$$=P(X_{n+m}=j\mid X_m=i), \tag{2-1}$$

只要式中条件概率有意义,则称$\{X_n,n\geqslant 0\}$为**马尔可夫链**.如果式(2-1)的右方与m无关,则称为齐次马尔可夫链.

2.2.1 齐次马尔可夫链的转移概率

称条件概率

$$p_{ij}^{(n)}=P(X_n=j\mid X_0=i) \qquad (i,j\in E),$$

为齐次马尔可夫链的n步**转移概率**.它表示该链从i出发经n步转移到j的概率.

1. 科尔莫戈罗夫-查普曼方程

科尔莫戈罗夫-查普曼(Kolmogorov-Chapman)方程简称K-C方程.

由于从i出发经$n+m$步到达j,必然可表达为,从i出发先经n步到达某一$k\in E$,然后再从k出发(与过去无关地)经m步再到达j.因此,有

$$p_{ij}^{(n+m)}=\sum_{k\in E}p_{ik}^{(n)}p_{kj}^{(m)} \qquad (i,j\in E,n,m\geqslant 0).$$

此即**科尔莫戈罗夫-查普曼方程**.

根据这一方程,任意步转移概率都可以通过一步转移概率来决定.

2. 转移概率矩阵

令

$$p_{ij}=p_{ij}^{(1)} \qquad (i,j\in E),$$

则矩阵

$$\boldsymbol{P}=[p_{ij}]_{i,j\in E},$$

称为齐次马尔可夫链的**转移概率矩阵**.它满足每行之和为1,即

$$\sum_{j\in E}p_{ij}=1,\quad i\in E.$$

具有这一性质的矩阵称为**随机矩阵**.由K-C方程及矩阵乘法运算规则知,$\boldsymbol{P}^n$的元素即为n步转移概率,即

$$\boldsymbol{P}^n=[p_{ij}^{(n)}]_{i,j\in E},\quad 且\quad \boldsymbol{P}^{n+m}=\boldsymbol{P}^n\cdot\boldsymbol{P}^m.$$

2.2.2 绝对概率与初始分布

(1) 绝对概率 称$P(X_n=i),i\in E$,为马尔可夫链$\{X_n,n\geqslant 0\}$在时刻n处于状态i的绝对概率,记为$p_i(n)$.

(2) 初始分布 称马尔可夫链在初始时刻的概率分布$\{p_i(0),i\in E\}$为它的

初始分布,简记为$\{p_i, i \in E\}$.

(3) 初始分布与绝对概率满足

$$p_i(n) = \sum_{k \in E} p_k p_{ki}^{(n)} \qquad (i \in E, n = 0,1,2,\cdots)$$

及

$$\sum_{i \in E} p_i(n) = 1 \qquad (n = 0,1,2,\cdots).$$

2.2.3 马尔可夫链的存在定理

给定$\{p_i, i \in E\}$满足$p_i \geq 0, i \in E, \sum_{i \in E} p_i = 1$及随机矩阵$\boldsymbol{P} = [p_{ij}]_{i,j \in E}$,则存在一个概率空间$(\Omega, \mathscr{F}, P)$及定义于其上的齐次马尔可夫链$\{X_n, n = 0,1,2,\cdots\}$使$E$为其状态空间,$\{p_i, i \in E\}$为其初始分布,$\boldsymbol{P}$为其转移概率矩阵.

2.2.4 马尔可夫链的闭集与状态分类

1. 互通

对于任何两个状态$i, j \in E$,若存在n使$p_{ij}^{(n)} > 0$,则称状态i可达状态j,记作$i \to j$.若$i \to j$且$j \to i$,则称状态i与状态j**互通**,记为$i \leftrightarrow j$.

2. 常返性

令$f_{ij}^{(n)} = P(X_{m+k} \neq j, k = 1,2,\cdots,n-1; x_{m+n} = j \mid X_m = i)$表示从状态$i$经$n$步首次到达$j$的条件概率(中间不经过$j$),则$f_{ij} = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)}$表示从$i$出发经有限步可达$j$的条件概率.如果$f_{ij} = 1$,令$\mu_{ij} = \sum_{n=1}^{\infty} n f_{ij}^{(n)}$,则$\mu_{ij}$表示自$i$出发初次到达$j$所走步数的数学期望.令

$$\mu_i = \mu_{ii},$$

称j为i的平均回访时间,记$f_j^{(n)} = f_{jj}^{(n)}, f_j = f_{jj}$.若$f_j = 1$,则称$j$为常返的;若同时有$\mu_j < \infty$,则称$j$为正常返的;若$\mu_j = \infty$,则称$j$为零常返的.

3. 闭集

设$C \subset E$,如果C外的任一状态都不能自C的任一状态到达,则称C为马尔可夫链的闭集.如果C不含任一闭的非空真子集,则称C为不可约闭集.若E本身是不可约闭集,则称该马尔可夫链为不可约的.

4. 周期

如果$\{n: p_{jj}^{(n)} > 0\}$的最大公约数为t,则称状态j有周期t.若$t > 1$,则称j为周期的,$t = 1$称j为非周期的.

5. 遍历

如状态j正常返,非周期,则称为遍历的.

6. 状态分类

对于任一马尔可夫链,相空间E可唯一地分解为有穷或可列多个不相交的子

集 $D, C_1, C_2, \cdots$ 的并，其中 D 由一切非常返状态构成；任一 C_j 是由常返状态构成的不可约闭集. C_j 中的状态属同一类：或者都是零常返的，或者都是遍历的，或者都是有同一周期的正常返状态.

2.2.5 遍历定理

定理1 如果 k 为非常返或零常返状态，则

$$\lim_{n\to\infty} p_{jk}^{(n)} = 0, \qquad (\forall j \in E).$$

因而若 E 为有穷集，则既不可能只有非常返态，也不可能只有零常返态，且如果存在一个零常返态必存在无穷多个零常返态.

定理2 如果 k 具有周期 t，$0 \leqslant r < t$，则 $\lim\limits_{n\to\infty} p_{jk}^{(nt+r)}$ 存在.

定理3（平均极限定理） 对于任意 $j, k \in E$，极限 $\lim\limits_{n\to\infty} \dfrac{1}{n}\sum\limits_{v=1}^{n} p_{jk}^{(v)}$ 存在，且

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{v=1}^{n} p_{jk}^{(v)} = \begin{cases} 0 & (k \in D \text{ 或为零常返}), \\ f(j, C)\dfrac{1}{\mu_k} & (k \in C), \end{cases}$$

其中 C 为一不可约闭集；$f(j, C)$ 表示从 j 出发在有限步到达 C 中的条件概率，即

$$f(j, C) = \sum_{k\in C} f_{jk}.$$

2.2.6 平稳马尔可夫链

定义1 如果对于任意 $n \geqslant 0, i \in E$，

$$P(X_n = i) = P(X_0 = i) = p_i,$$

与 n 无关，则称马尔可夫链为平稳的.

具有上述性质的初始分布 $\{p_i, i \in E\}$ 称为**平稳分布**.

定理4 若 E 为不可约闭集，由正常返、非周期状态组成，则存在唯一的平稳分布

$$p_i = \frac{1}{\mu_i} \quad (i \in E),$$

其中 μ_i 为状态 i 的平均回访时间，$\sum\limits_{i\in E} \dfrac{1}{\mu_i} = 1$.

定理5 若 E 的一切正常返的不可约闭集类为 $\{C_\alpha, \alpha \in \Gamma\}$，令 $H = \bigcup\limits_{\alpha\in\Gamma} C_\alpha$. 设 $\{p_i, i \in E\}$ 为该马尔可夫链的初始分布，那么它是平稳分布的充分必要条件是存在非负数列 $\{\lambda_\alpha, \alpha \in \Gamma\}$，$\sum\limits_{\alpha\in\Gamma} \lambda_\alpha = 1$，使

$$p_i = 0 \qquad (i \bar{\in} H),$$

$$p_i = \frac{\lambda_\alpha}{\mu_i} = \lambda_\alpha \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{v=1}^{n} p_{ii}^{(v)} \qquad (i \in C_\alpha).$$

定理6（平稳分布存在唯一的条件） 当且仅当 E 纯由非常返状态或零常返

状态组成时,平稳分布不存在.

当且仅当 E 仅有一个正常返状态类时平稳分布唯一.

如果至少有两个正常返的不可约闭集,则存在无穷多个平稳分布.

2.2.7　随机游动

1. 具有吸收壁的随机游动

定义 2　若齐次马尔可夫链的状态空间 $E=\{0,1,2,\cdots,M\}$,转移概率矩阵

$$P=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ q & 0 & p & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & p & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & q & 0 & p \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ \vdots \\ M-1 \\ M \end{matrix},$$

其中 $0<p<1, p+q=1$,则称此链为具有吸收壁 0 和 M 的**随机游动**.

例 1　在直线上运动的质点,当它处于位置 $i(0<i<M)$ 时,下一步以概率 q 运动到 $i-1$,以概率 p 运动到 $i+1$,一旦到达状态 0 或 M,就永远停留在 0 或 M 上,此即具有吸收壁 0 和 M 的随机游动.

这说明它有两个正常返闭集类 $\{0\}$ 和 $\{M\}$,而 $\{1,2,\cdots,M-1\}$ 为非常返状态集.此时

$$\lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)}=f_{i0}\qquad (i=0,1,2,\cdots,M).$$

它满足差分方程

$$\begin{cases} f_{i0}=qf_{i-1,0}+pf_{i+1,0} & (i=1,2,\cdots,M-1), \\ f_{00}=1, \\ f_{M0}=0. \end{cases}$$

解得

$$f_{i0}=\begin{cases} \dfrac{M-i}{M} & (p=q), \\ \dfrac{\left(\dfrac{q}{p}\right)^i-\left(\dfrac{q}{p}\right)^M}{1-\left(\dfrac{q}{p}\right)^M} & (p\neq q), \end{cases}$$

其中 $i=0,1,2,\cdots,M$. 当 $M\to\infty$ 时,链成为具有一个吸收壁"0"的半直线上的随机游动,此时

$$f_{i0}=\begin{cases} 1 & (p\leqslant q), \\ \left(\dfrac{q}{p}\right)^i & (p>q). \end{cases}$$

这表示当向左移一格的概率 q 不小于向右移一格的概率 p 时,无论从什么状态出

发，该链最终以概率1处于吸收状态“0”；而当 $q < p$ 时，该链以概率 $\left(\frac{q}{p}\right)^i$ 处于吸收状态“0”，以概率 $1-\left(\frac{q}{p}\right)^i$ 在状态1，2，⋯中游动.

上例的第一部分中，f_{i0} 相当于一个赌徒具有赌本 i，与一个具有赌本 $M-i$ 的对手赌博时输光的概率；第二部分（$M\to\infty$）中 f_{i0} 相当于一个具有赌本 i 的赌徒与具有无限赌本的对手赌博时最终输光的概率.

2. 具有反射壁的随机游动

定义3 在定义2中，若

$$P=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ q & 0 & p & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & p & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & q & 0 & p \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ \vdots \\ M-1 \\ M \end{matrix},$$

则称该链为具有反射壁0和 M 的随机游动.该链为正常返、不可约、周期为2的齐次马尔可夫链.

3. 自由随机游动

定义4 若 E 为全体整数集，对于任意 $i\in E$，有

$$p_{i,i-1}=q,\quad p_{i,i+1}=p \qquad (0<p<1,p+q=1),$$

则称具有该转移概率矩阵 $\boldsymbol{P}=[p_{ij}]$ 的齐次马尔可夫链为直线上的自由随机游动.该链是不可约的，全部状态周期为2. 当 $p=q=\frac{1}{2}$ 时，全为零常返状态；而当 $p\neq q$ 时，所有状态为非常返的.

2.3 连续时间马尔可夫链

定义5 若状态空间 E 为可数集，参数集 $T=[0,\infty)$，且对于任何 $n\geqslant 0,i_0,i_1,i_2,\cdots,i_n,i,j\in E,0\leqslant t_0<t_1<t_2<\cdots<t_n<s<t<\infty$，都有 $P(X_t=j\mid X_s=i)$ 存在，且

$$P(X_t=j\mid X_s=i,X_{t_n}=i_n,\cdots,X_{t_0}=i_0)=P(X_t=j\mid X_s=i),$$

则称随机过程 $\{X_t,t\in T=[0,\infty)\}$ 为连续时间马尔可夫链.称

$$p_{ij}(s,t)=P(X_t=j\mid X_s=i)$$

为其转移概率函数.若 $p_{ij}(s,t)$ 仅与 $t-s$ 有关，则称为齐次马尔可夫链，记 $p_{ij}(s,t)$ 为 $p_{ij}(t-s)$.

齐次转移概率函数 $p_{ij}(t)$ 具有如下性质：

1° $p_{ij}(t)\geqslant 0,\quad \sum_{j\in E}p_{ij}(t)=1;$

2° 满足 K-C 方程,即

$$p_{ij}(s+t) = \sum_{k\in E} p_{ik}(s) p_{kj}(t).$$

3° 若它还满足

$$p_{ij}(0) = \lim_{t\to 0+} p_{ij}(t) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i=j), \\ 0 & (i\neq j), \end{cases}$$

则称

$$\boldsymbol{P}(t) = [p_{ij}(t)]_{i,j\in E} \qquad (t\in[0,\infty)),$$

为**标准转移矩阵**.

2.3.1 标准转移概率函数 $p_{ij}(t)$ 的连续性和可微性

1° $p_{ij}(t)$ 在 $[0,\infty)$ 上一致连续,且

$$|p_{ij}(t+\Delta t) - p_{ij}(t)| \leqslant 1 - p_{ii}(\Delta t) \qquad (i,j\in E).$$

2° 标准转移矩阵中每一元素 $p_{ij}(t)$ 在 $(0,\infty)$ 上有有限连续导数,且满足方程

$$p'_{ij}(s+t) = \sum_{k\in E} p_{ik}'(s) p_{kj}(t) \qquad (s>0, t>0, i,j\in E).$$

3° 若 $\boldsymbol{P}(t) = [p_{ij}(t)]$ 为标准转移矩阵,则 $p_{ij}(t)$ 在 0 点的右导数存在(可能无穷),即

$$p'_{ii}(0) = \lim_{t\to 0+} \frac{p_{ii}(t) - 1}{t} \geqslant -\infty.$$

记 $q_{ii} = +p'_{ii}(0)$,令 $q_i = -q_{ii}$,当 $i\neq j$ 时,$p_{ij}(t)$ 在"0"点存在有穷的右导数,即

$$0 \leqslant \lim_{t\to 0+} \frac{p_{ij}(t)}{t} = p'_{ij}(0) = q_{ij} < \infty \qquad (i\neq j),$$

且

$$0 \leqslant \sum_{j\neq i} q_{ij} \leqslant q_i \leqslant \infty (i\in E).$$

称 $\boldsymbol{Q} = [q_{ij}]$ 为转移矩阵 $\boldsymbol{P}(t)$ 或马尔可夫链 $X = \{X_t : t\geqslant 0\}$ 的**密度矩阵**或 **$\boldsymbol{Q}$ 矩阵**.

2.3.2 密度矩阵的概率意义

(1) 对于任意 $s\geqslant 0, i\in E$,

$$P(X_{s+u} \equiv i, 0\leqslant u\leqslant t \mid X_s = i) = \exp(-q_i t).$$

若 $q_i = 0$,则称 i 为吸收状态;若 $q_i = \infty$,则称 i 为瞬时状态;若 $0 < q_i < \infty$,称 i 为逗留状态.令

$$\tau(\omega) = \inf\{t : X_t(\omega) \neq X_0(\omega)\}$$

为离开初始状态的时刻.

(2) 若 X 是博雷尔可测过程,$q_i < \infty$,$0 < q_{ij}$,$i\neq j$,则 $P(X_t$ 在 $[0,\alpha)$ 中有第一个不连续点 τ,且它是跳跃点;$(X_{\tau+0} = j \mid X_0 = i) = (1 - e^{-q_i\alpha}) \dfrac{q_{ij}}{q_i}$;

$P(X_t$ 在$[0,\infty)$中有第一个不连续点 τ,且它是跳跃点;$(X_{\tau+0}=j\mid X_0=i)=\dfrac{q_{ij}}{q_i}$.

2.3.3 向前与向后微分方程

设 $\boldsymbol{P}(t)=[p_{ij}(t)]$ 是标准转移矩阵,其密度矩阵为 $\boldsymbol{Q}$,则有

$$p'_{ij}(t)\geqslant -q_ip_{ij}(t)+\sum_{k\neq i}q_{ik}p_{kj}(t),$$

$$p'_{ij}(t)\geqslant -p_{ij}(t)q_j+\sum_{k\neq j}p_{ik}(t)q_{kj}.$$

若以上二式等号成立,则分别称为向后方程和向前方程,其矩阵形式为

$$\boldsymbol{P}'(t)=\boldsymbol{QP}(t)\qquad(\text{向后方程组}),$$

$$\boldsymbol{P}'(t)=\boldsymbol{P}(t)\boldsymbol{Q}\qquad(\text{向前方程组}).$$

这两个方程组亦称科尔莫戈罗夫向后或向前方程组.

若对于某 i,有

$$\infty>q_i=\sum_{j\neq i}q_{ij},$$

则对于此 i 及一切 j,向后方程成立.

若对于某 j,有 $q_j<\infty$,且

$$\lim_{t\to 0_+}\frac{p_{kj}(t)}{t}=q_{kj},$$

对 k 一致成立,则对于此 j 及一切 i,向前方程成立.

2.3.4 Q 过程

定义 6 设已给矩阵 $\boldsymbol{Q}=[q_{ij}]_{i,j\in E}$ 满足

$$0\leqslant q_{ij}\qquad(i\neq j),$$

$$\sum_{j\neq i}q_{ij}=-q_{ii}=q_i.$$

若转移矩阵 $\boldsymbol{P}(t)=[p_{ij}(t)]$(或广转移矩阵,即满足 $\sum_{j\in E}p_{ij}(t)\leqslant 1$)满足

$$\lim_{t\to 0}\frac{p_{ij}(t)-\delta_{ij}}{t}=q_{ij}\qquad(i,j\in E),$$

则称 $\boldsymbol{P}(t)=[p_{ij}(t)]$ 为 **$\boldsymbol{Q}$ 转移矩阵或 $\boldsymbol{Q}$ 过程.**

定理 7 如果对于一切 $i\in E$, $q_i<\infty$,则称 $\boldsymbol{Q}$ 为保守的.若 $\boldsymbol{Q}$ 矩阵保守,则标准转移矩阵 $\boldsymbol{P}=(t)[p_{ij}(t)]$ 是 $\boldsymbol{Q}$ 转移矩阵的充分必要条件是它满足科尔莫戈罗夫向后方程组.

定理 8(最小解的构造) 若已给保守矩阵 $\boldsymbol{Q}$,令

$${}_0p_{ij}(t)=\delta_{ij}\exp(-q_it),$$

$${}_{n+1}p_{ij}(t)=\sum_{k\neq i}\int_0^t\exp(-q_is)q_{ik\,n}p_{kj}(t-s)\mathrm{d}s\qquad(n\geqslant 0),$$

再令

$$p_{ij}^{\min}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} {}_n p_{ij}(t) \qquad (i,j \in E),$$

则 $p_{ij}^{\min}(t)$ 是满足科尔莫戈罗夫向后方程组的最小解. 即对于方程组的任意广转移函数解 $g_{ij}(t)$,必有

$$g_{ij}(t) \geqslant p_{ij}^{\min}(t) \qquad (t \geqslant 0, i,j \in E),$$

其中 $p_{ij}^{\min}(t), t \geqslant 0, i,j \in E$ 是广转移函数,即它满足

$$0 \leqslant p_{ij}^{\min}(t) \leqslant 1, \quad \sum_{j \in E} p_{ij}^{\min}(t) \leqslant 1,$$

$$p_{ij}^{\min}(s+t) = \sum_{k \in E} p_{ik}^{\min}(s) p_{kj}^{\min}(t),$$

而且 $p_{ij}^{\min}(t), t \geqslant 0, i,j \in E$ 也是科尔莫戈罗夫向前方程的解.

定理 9 若 Q 为保守矩阵,则 Q 过程唯一的充分必要条件是其最小解满足

$$\sum_j p_{ij}^{\min}(t) = 1 \qquad (t \geqslant 0, i \in E).$$

定理 10 若 Q 为保守矩阵,且 $q_i > 0, i \in E$,则 Q 过程唯一的充分必要条件是,对于某 $\lambda > 0$,方程组

$$(\lambda + q_i) u_i = \sum_{j \neq i} q_{ij} u_j \qquad (i \in E)$$

无非平凡的非负有界解(平凡解即 $u_i \equiv 0$).

关于 Q 过程唯一性准则,可参阅文献[12].

2.3.5 离散骨架与平稳分布

定理 11 若 $P = [p_{ij}(t)]$ 是连续时间马尔可夫链 $X = \{X_t, t \geqslant 0\}$ 的转移矩阵,且它是标准的,则 $p_{ij}(t)$ 或者恒正,或者恒为"0".

定义 7 对于任意 $h > 0$,称 $X_h = \{X_{hn}: n = 0,1,2,\cdots\}$ 为 X 的离散骨架, X_h 是离散时间齐次马尔可夫链. X_h 与 X 有相同的开始分布,定义在同一概率空间上. 其转移矩阵为

$$\boldsymbol{P} = [p_{ij}(nh)]_{i,j \in E}.$$

定义 8 如果在 X 的某一离散骨架 X_h 中 i 可达 j,则称状态 i 可达 j,也等价于存在 t(或对一切 t),使 $p_{ij}(t) > 0$. 若 i 可达 j, j 可达 i,则称 i,j 互通.

定理 12 若转移矩阵中任一元素 $p_{ij}(t)$ 关于 t 可测,则存在极限

$$v_{ij} = \lim_{t \to \infty} p_{ij}(t) \qquad (i,j \in E).$$

定理 13 若 $X_1 = \{X_n, n \geqslant 1\}$ 一切状态互通且周期为 1,则

$$v_j = \lim_{t \to \infty} p_{ij}(n),$$

即 $v_{ij} = v_j$,与 i 无关. $\{v_j\}$ 是 X_1 的平稳分布,若以 $\{v_j\}$ 为 X 的初始分布,则它也是 X 的平稳分布.

2.3.6 生灭过程

定义 9 设 $X = \{X_t, t \geqslant 0\}$ 是状态空间 $E = \{0,1,2,\cdots\}$ 的齐次马尔可夫链,

称 X 为**生灭过程**，如果其转移矩阵 $P=[p_{ij}(t)]$ 的密度矩阵 Q 具有下列形式：

$$Q=\begin{bmatrix} -b_0 & b_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ a_1 & -(a_1+b_1) & b_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_n & -(a_n+b_n) & b_n & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \end{bmatrix},$$

即

$$q_{i,i+1}=b_i,\quad q_{i,i-1}=a_i,$$
$$q_{ii}=-(a_i+b_i),\quad q_{ij}=0\qquad(\text{当 } |i-j|>1 \text{ 时}),$$

其中 $b_i>0(i\geqslant 0)$，$a_i>0(i>0)$．称此 Q 矩阵为生灭矩阵．

推论 1　对于生灭矩阵 Q，其向后方程为

$$p'_{ij}(t)=-(a_i+b_i)p_{ij}(t)+b_ip_{i+1,j}(t)+a_ip_{i-1,j}(t)\qquad(i>0),$$
$$p'_{0j}(t)=-b_0p_{0j}(t)+b_0p_{1j}(t)\qquad(j=0,1,2,\cdots);$$

向前方程为

$$p'_{ij}(t)=-(a_j+b_j)p_{ij}(t)+b_{j-1}p_{i,j-1}(t)+a_{j+1}p_{i,j+1}(t)\qquad(j>0),$$
$$p'_{i0}(t)=-b_0p_{i0}(t)+a_1p_{i1}(t)\qquad(i=0,1,2,\cdots).$$

两组方程的初始条件为

$$p_{ij}(0)=\delta_{ij}\qquad(i,j\in E).$$

推论 2　生灭矩阵 Q 的向后向前方程组有唯一解（即最小解）的充分必要条件是

$$\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{b_i}+\sum_{i=1}^{\infty}\sum_{k=0}^{i-1}\frac{a_ia_{i-1}\cdots a_{i-k}}{b_ib_{i-1}\cdots b_{i-k}b_{i-k-1}}=\infty.$$

推论 3　若上述条件成立，则平稳分布存在的充分必要条件是

$$e_1=\frac{1}{a_1}+\sum_{k=0}^{\infty}\frac{b_1b_2\cdots b_{k+1}}{a_1a_2\cdots a_{k+1}a_{k+2}}<\infty.$$

此时平稳分布 $\{v_i,i\geqslant 0\}$ 满足

$$v_0=(1+b_0e_1)^{-1},$$
$$v_j=\frac{b_0b_1\cdots b_{j-1}}{a_1a_2\cdots a_j(1+b_0e_1)}\qquad(j>0).$$

2.4　一般马尔可夫过程

定义 10　设 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 为完备概率空间，$(E,\mathscr{B})$ 为可测空间，$T=[0,\infty)$，如果对于一切 $0\leqslant s<t$，$\mathscr{F}_s\subset\mathscr{F}_t$，则称 $\mathscr{F}$ 的子 σ 代数族 $\{\mathscr{F}_t,t\geqslant 0\}$ 为 σ 代数流．

定义 11　若 $\{X_t,t\geqslant 0\}$ 为 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 上以 $(E,\mathscr{B})$ 为相空间的随机过程，则称 $\{\mathscr{N}_t,t\geqslant 0\}$ 为自然 σ 代数流，其中 $\mathscr{N}_t=\sigma(X_s,s\leqslant t)$，记 $\mathscr{N}=\sigma(X_t,t\geqslant 0)$．

定义 12　称关于 σ 代数流 $\{\mathscr{F}_t,t\geqslant 0\}$ 适应的随机过程 $\{X_t,t\geqslant 0\}$ 为马尔可夫

过程,如果对于一切 $0 \leqslant s \leqslant t$ 及 $\Gamma \in \mathscr{B}$,有

$$P(X_t \in \Gamma \mid \mathscr{F}_s) = P(X_t \in \Gamma \mid X_s) \qquad (\text{a.s.}),$$

其中

$$P(X_t \in \Gamma \mid X_s) = P(X_t \in \Gamma \mid \sigma(X_s)).$$

此时称 $\{X_t, \mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$ 为马尔可夫过程.

推论 4 如果 $\{X_t, \mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$ 为马尔可夫过程,则 $\{X_t, \mathscr{N}_t, t \geqslant 0\}$ 也是马尔可夫过程.

定理 14 $\{X_t, \mathscr{N}_t, t \geqslant 0\}$ 为马尔可夫过程的充分必要条件是对于任意 n,任意 $0 \leqslant t_1 < t_2 < \cdots < t_n$ 及 $\Gamma \in \mathscr{B}$,有

$$P(X_{t_n} \in \Gamma \mid X_{t_1}, X_{t_2}, \cdots, X_{t_{n-1}}) = P(X_{t_n} \in \Gamma \mid X_{t_{n-1}}) \qquad (\text{a.s.}).$$

2.4.1 转移概率函数

定义 13 称四元函数 $p(s, x; t, \Gamma), s, t \in T, s \leqslant t, \Gamma \in \mathscr{B}, x \in E$ 为**正规转移概率函数**,如果它满足以下四个条件:

1° 对于固定的 x, s, t,它是关于 Γ 在 $\mathscr{B}$ 上的概率测度;

2° 对于固定的 s, t, Γ,它是关于 x 的 $\mathscr{B}$ 可测函数;

3° 对于任一 s,

$$p(s, x; s, \Gamma) = I_\Gamma(x),$$

其中 I 是集合的示性函数;

4° K-C 方程成立,即对于任何 $0 \leqslant s \leqslant t \leqslant u$,有

$$p(s, x; u, \Gamma) = \int_E p(s, x; t, \mathrm{d}y) p(t, y; u, \Gamma),$$

定理 15 若 $p(s, x; t, \Gamma)$ 当 x, Γ 固定时仅与 $t\text{-}s$ 有关,则称转移概率函数为齐次的.此时存在 $p(t, x, \Gamma)$ 使

$$p(s, x; t, \Gamma) \equiv p(t - s, x, \Gamma).$$

定理 16 若 $p(t, x, \Gamma)$ 为齐次转移概率函数,则满足

1° 对于固定的 $t, x, p(s, x, \cdot)$ 为 $\mathscr{B}$ 上概率测度;

2° 对于固定的 $t, \Gamma, p(s, \cdot, \Gamma)$ 为 E 上 $\mathscr{B}$ 可测函数;

3° $p(0, x, \Gamma) = I_\Gamma(x)$;

4° 对于任意 $s, t \geqslant 0$,有

$$p(s + t, x, \Gamma) = \int_E p(s, x, \mathrm{d}y) p(t, y, \Gamma).$$

2.4.2 马尔可夫半群与费勒转移函数

1. 马尔可夫半群

定理 17 设 $p(t, x, \Gamma)$ 为齐次马尔可夫过程的转移概率函数,在 E 的有界 $\mathscr{B}$ 可测函数类上定义算子

$$\mathrm{T}_t f(x) = \int_E f(y) p(t, x, \mathrm{d}y) \qquad (t \geqslant 0).$$

则 T_tf 也是有界 $\mathscr{B}$ 可测函数. $\{T_t, t \geqslant 0\}$ 是一半群,称为**马尔可夫半群**,即对于任意 $s, t \in T$,有

$$T_{s+t} = T_sT_t.$$

可利用泛函分析的半群理论来研究齐次转移概率函数.

2. 费勒转移函数

定理 18 如果对于任一 $t \geqslant 0$ 及 E 上任一有界连续函数 f, T_tf 也是连续函数,则称 $p(t, x, \Gamma)$ 为**费勒转移函数**. 相应的马氏过程为费勒过程,称 $\{T_t, t \geqslant 0\}$ 为费勒半群.

2.4.3 标准齐次马尔可夫过程

定义 14 如果在 $\mathscr{N} = \sigma(X_t, t \geqslant 0)$ 上存在概率测度族 $\{P_x, x \in E\}$,使得对于每一个 x,

$$P_x(X_0 = x) = 1,$$

且以 $p(t, x, \Gamma)$ 为转移函数,则称以 $p(t, x, \Gamma)$ 为转移函数的齐次马尔可夫过程 $\{X_t, t \geqslant 0\}$ 为**标准齐次马尔可夫过程**.

定理 19 齐次马尔可夫过程成为标准齐次马可尔夫过程的充分必要条件是集函数

$$P_x(X_{t_1} \in \Gamma_1, X_{t_2} \in \Gamma_2, \cdots, X_{t_n} \in \Gamma_n) = \int_{\Gamma_1} p(t_1, x, dy_1) \times \int_{\Gamma_2} p(t_2 - t_1, y_1, dy_2) \times \cdots \times \int_{\Gamma_n} p(t_n - t_{n-1}, y_{n-1}, dy_n)$$

可唯一地扩张成 $\mathscr{N}$ 上的概率测度,其中 $0 \leqslant t_1 < \cdots < t_n, \Gamma_1, \Gamma_2, \cdots, \Gamma_n \in \mathscr{B}$.

例 2 在 $(\mathbf{R}^T, \mathscr{B}^T)$ 上定义

$$X_t(\omega) = \omega(t) \qquad (t \in T),$$

对于任意柱集 $B_n = \{\omega(\cdot): \omega(t_1) \in \Gamma_1, \omega(t_2) \in \Gamma_2, \cdots, \omega(t_n) \in \Gamma_n\}$,令

$$P_x(B_n) = \int_{\Gamma_1} p(t_1, x, dy_1) \int_{\Gamma_2} p(t_2 - t_1, y_1, dy_2) \cdots \int_{\Gamma_n} p(t_n - t_{n-1}, y_{n-1}, dy_n),$$

则对于每一 $x \in E = \mathbf{R}_1, \mathscr{B} = \mathscr{B}_1$, $\{X_t, t \geqslant 0\}$ 为 $(\mathbf{R}^T, \mathscr{B}^T, P_x)$ 上的标准齐次马尔可夫过程. 其转移概率函数为 $p(t, x, \Gamma)$.

2.4.4 强马尔可夫过程

定义 15 称标准齐次马尔可夫过程 $(X_t, \mathscr{N}_t)$ 为**强马尔可夫过程**,如果

1° $\{X_t, \mathscr{N}_t\}$ 循序可测;

2° 对于任意 $\mathscr{N}_t$ 停时 τ 及 $\Gamma \in \mathscr{B}$,

$$P_x(X_{t+\tau} \in \Gamma \mid X_\tau) = p(t, x_\tau, \Gamma) \qquad (\text{a.s.}, P_x, \Omega_\tau),$$

其中 a.s., P_x, Ω_τ 表示在 Ω_τ 上关于 P_x 几乎必然成立,而 $\Omega_\tau = \{\omega: \tau(\omega) < \infty\}$;这亦等价于对于一切有界 $\mathscr{B}$ 可测函数 f,

$$E_x(f(x_{\tau+t}) \mid \mathscr{N}_\tau) = E_{x_\tau}f(x_t) \qquad (\text{a.s.}, P_x, \Omega_\tau).$$

推论 5　右连续费勒过程是强马尔可夫过程. 此处右连续是指样本函数 $X_t(\omega)$ 关于 t 右连续.

2.5　间断型马尔可夫过程

设 E 为 $\mathbf{R}_1$ 中博雷尔可测集, $\mathscr{B}$ 是 E 的一切博雷尔可测子集的 σ 代数. $p(t,x,A)$ 为转移概率函数, 称它满足条件(C), 如果

$$\lim_{t\to 0+} p(t,x,\{x\}) = 1 \qquad (x\in E). \tag{2-2}$$

若条件(C)满足, 则对于一切 $x\in E$, 存在极限

$$\lim_{t\to 0+} \frac{1-p(t,x,\{x\})}{t} = q(x),$$

其中 q 是博雷尔可测函数, 且 $0\leqslant q(x)\leqslant\infty$.

若式(2-2)在集 $U\in\mathscr{B}$ 上一致成立, $x\in U$, 则存在极限

$$\lim_{t\to 0+} \frac{p(t,x,U)}{t} = q(x,U)\leqslant q(x).$$

对于固定的 U, $q(\cdot,U)$ 为博雷尔可测函数.

称二函数 $q(x)$, $q(x,A)$, $x\in E$, $A\in\mathscr{B}$ 为标准对, 如果它们都非负有穷, 关于 x 为可测函数, 关于 A, $q(x,A)$ 为 $\mathscr{B}$ 上测度, 且满足

$$q(x,\{x\}) = 0,\quad q(x) = q(x,E).$$

定义 16　若齐次马尔可夫过程 $\{X_t, t\geqslant 0\}$ 的转移概率函数具有标准对 $q(x)$, $q(x,A)$, 且 $0<q(x)<\infty$, 则

1° $P_x(X_t(\omega)$, 在 $[0,\alpha)$ 中有第一个断点 $\tau(\omega)$, 且它是跳跃点;

$$X_s(\omega)\equiv x,\ s<\tau(\omega),\ X_{\tau+0}(\omega)\in U) = (1-e^{-q(x)\alpha})q(x,U)/q(x).$$

2° $P_x(X_t(\omega)$, 在 $[0,\infty)$ 上有第一个断点 $\tau(\omega)$, 且它是跳跃点;

$$X_s(\omega)\equiv x,\ s<\tau(\omega);\ X_{\tau+0}(\omega)\in U) = q(x,U)/q(x).$$

3° 向后方程成立, 即

$$p'(t,x,A) = \int_{E\setminus\{x\}} p(t,x,A)q(x,\mathrm{d}y) - q(x)p(x,xA).$$

4° 若 $X_t(\omega)$, 对于任何固定的 t 前, 有最后一个断点为跳跃点, 且 $q(x)$ 在 A 上有界, 则向前方程成立, 即

$$p'(t,x,A) = -\int_A q(y,E\setminus A)p(t,x,\mathrm{d}y) + \int_{E\setminus A} q(y,A)p(t,x,\mathrm{d}y).$$

以上这类过程称为间断型马尔可夫过程或**跳过程**.

2.6　扩散过程

历史上, 扩散过程起源于对物理学中扩散现象的研究. 扩散过程最一般的定义是轨道连续的马尔可夫过程. 而 1931 年科尔莫戈罗夫是以转移函数定义扩散过程的.

定义 17 假定直线上马尔可夫过程的转移函数为 $p(s,x;t,A)$，若对于任意 $\varepsilon > 0$，

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|y-x| \geq \varepsilon} p(t,x;t+\Delta t,\mathrm{d}y) = 0,$$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|y-x| \leq \varepsilon} (y-x) p(t,x;t+\Delta t,\mathrm{d}y) = a(t,x),$$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|y-x| \leq \varepsilon} (y-x)^2 p(t,x;t+\Delta t,\mathrm{d}y) = b(t,x),$$

且上述极限关于 t 在某个区间 $[t_0,t_1]$ 及 $x \in (-\infty,\infty)$ 是一致的，则称具有该转移函数的马尔可夫过程为扩散过程，称 $a(t,x)$ 为偏移系数，称 $b(t,x)$ 为扩散系数.

定理 20 在适当条件下，若 $p(s,x;t,A)$ 具有转移密度 $p(s,x;t,y)$，且满足二阶偏微分方程

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y}[a(t,y)p(s,x;t,y)] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}[b(t,y)p(s,x;t,y)],$$

$$\frac{\partial p}{\partial s} = -a(s,x)\frac{\partial p(s,x;t,y)}{\partial x} - \frac{b(s,x)}{2}\frac{\partial^2 p(s,x;t,y)}{\partial x^2},$$

则这两个二阶偏微分方程分别称为科尔莫戈罗夫向前方程和向后方程，前者也称为福克尔-普朗克(Fokker-Planck)方程. 这两个方程是扩散过程研究中的基本分析对象.

另一种研究扩散过程的方法是将 $X(t)$ 表作下述伊藤随机微分方程的解：

$$\mathrm{d}X(t) = a(t,X(t))\mathrm{d}t + \sigma(t,X(t))\mathrm{d}W(t),$$

$$X(t) = X(t_0) + \int_{t_0}^{t} a(s,X(s))\mathrm{d}s + \int_{t_0}^{t} \sigma(s,X(s))\mathrm{d}W(s),$$

其中 $\sigma^2(t,x) = b(t,x)$ 为扩散系数，$W(t)$ 是标准布朗运动(见第4章).

对扩散过程的这种研究方法详见本卷“随机分析”篇.

3 平稳过程

3.1 平稳过程概述

统计特性不随时间的推移而变化的过程称为平稳过程. 例如，一台稳定工作的纺纱机纺出的纱的直径大小，受各种随机因素影响，在某一标准值周围波动，在任意若干时刻处，直径之间的统计依赖关系，仅与这些时刻之间的相对位置有关，而与其绝对位置无关，因而直径的变化过程可以看做一个平稳过程. 具有近似于这种性质的随机过程，在实际中是大量存在的. 特别是，当除去它们的确定性成分(如周期变化的部分、呈现某种趋势的部分)后，其随机分量部分大多是平稳随机过程.

平稳过程的基本理论是在20世纪30～40年代发展起来的，且已相当完善. 其

后的研究主要是向某些特殊类型以及多维平稳过程、平稳广义过程和齐次随机场等方面发展.平稳过程理论在无线电技术和自动控制等领域有着广泛的应用,并且是诸如时间序列分析、信号分析、滤波、预测理论及控制理论等应用学科的重要工具.

定义 1 设 $X=\{X(t),t\in T\}$ 是一个取复数值或实数值的随机过程,其中 T 为整数或实数全体(分别称为离散参数和连续参数).如果对于任意 $n\in\mathbf{N}$ 及任意的 $t_1,t_2,\cdots,t_n,\tau\in T$,$(X(t_1+\tau),\cdots,X(t_n+\tau))$ 与 $(X(t_1),X(t_2),\cdots,X(t_n))$ 的概率分布相同,则称 X 为严平稳过程.如果二阶绝对矩 $E|X(t)|^2<\infty$,且对于任意的 $t,\tau\in T$,均值 $EX(t)=m$(常数),协方差

$$E(X(t+\tau)-m)\overline{(X(\tau)-m)}=R(t)\qquad(与\ \tau\ 无关),$$

则称 X 为宽平稳过程,$R(t)$ 称为 X 的协方差函数.

一个严平稳过程,如果它的二阶矩有限,则一定也是宽平稳过程.

3.2 宽平稳过程

3.2.1 随机过程的均方连续性及微积分

定义 2 若 $\{X_n\}$ 为一随机序列,X 为一随机变量且满足 $\lim\limits_{n\to\infty}E|X_n-X|^2=0$,则称 $\{X_n\}$ 均方收敛到 X,记为

$$\underset{n\to\infty}{\mathrm{l.i.m.}}\,X_n=X.$$

定义 3 若对于一切 $t,t_0\in T$,

$$\lim_{t\to t_0}E|X(t)-X(t_0)|^2=0,$$

则称随机过程 $\{X(t),t\in T\}$ **均方连续**.

定义 4 若对于 $t,t+\Delta t\in T$,有

$$\underset{\Delta t\to 0}{\mathrm{l.i.m.}}\,\frac{X(t+\Delta t)-X(t)}{\Delta t}$$

存在,则称 $\{X(t),t\in T\}$ 在 t 点均方可微.

定义 5 考虑 T 内区间 $[a,b]$ 上的一个分割 $a=t_0<t_1<\cdots<t_n=b$,若黎曼(C.F.B.Riemann)和 $\sum\limits_{i=0}^{n-1}X_{t_i^*}(t_{i+1}-t_i)$ 对于任意 $t_i^*\in(t_i,t_{i+1}]$,$i=0,\cdots,n-1$,当 $n\to\infty$ 及 $\|\Delta t\|=\max\limits_{0\le i\le n-1}(t_{i+1}-t_i)\to 0$ 时均方收敛到一个有限极限,则称随机过程在 $[a,b]$ 上均方可积,记为

$$\underset{\|\Delta t\|\to 0}{\mathrm{l.i.m.}}\sum_{i=0}^{n-1}X_{t_i^*}(t_{i+1}-t_i)=\int_a^b X(t)\mathrm{d}t.$$

定义 6 若对于任给定的 $t_1<t_2<t_3<t_4$,$\{X(t),t\in T\}$ 满足

$$E(X(t_2)-X(t_1))\overline{(X(t_4)-X(t_3))}=0,$$

则称 $\{X(t),t\in T\}$ 为**正交增量过程**.

对于正交增量过程$\{y(t),t\in T\}$,存在非降实函数F,满足

$$F(t)-F(s)=E\mid y(t)-y(s)\mid^2 \quad (s<t),$$

且对于任何

$$\int_a^b |f(t)|^2F(\mathrm{d}t)<\infty,$$

可以合理定义积分$\int_a^b f(t)y(\mathrm{d}t)$,使得

$$E\left|\int_a^b f(t)y(\mathrm{d}t)\right|^2=\int_a^b|f(t)|^2F(\mathrm{d}t).$$

3.2.2 协方差函数的谱分解

平稳过程的协方差函数$R(\tau)$具有下述性质:

1° $R(\tau)=R(-\tau)$;

2° $|R(\tau)|\leqslant R(0)$;

3° $R(\tau)$非负定,即对于任意$n\in\mathbf{N}$,复数$a_1,a_2,\cdots,a_n$,及$t_1,t_2,\cdots,t_n\in T$,有

$$\sum_{i,j=1}^n R(t_i-t_j)a_i\bar{a}_j\geqslant 0;$$

4° $\{X(t),t\in T\}$均方连续的充分必要条件是$R(\tau)$在$\tau=0$处连续.

协方差函数是刻画平稳过程的重要数字特征.可以用傅里叶(J.B.J.Fourier)变换来研究协方差函数的谱分解.

定理1 $R(\tau)$连续、非负定的充分必要条件是存在一个函数$F(\lambda)$,使

$$R(\tau)=\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\mathrm{i}\lambda\tau)F(\mathrm{d}\lambda).$$

将$R(\tau)$表成上式的形式,称为$R(\tau)$的谱分解,F称为谱函数.

由于任意非负定函数$R(\tau)$均可作为平稳正态过程的协方差函数,因此$R(\tau)$的谱分解式就是均方连续平稳过程协方差函数的特征性质.其谱函数称为相应的平稳过程的谱函数.

定理2 平稳序列$\{X_n,n\in\mathbf{Z}\}$的协方差函数的谱分解可表为

$$R(n)=\int_{-\pi}^{\pi}\exp(\mathrm{i}n\lambda)F(\mathrm{d}\lambda),$$

其中$F(\lambda)$右连续、有界、非降.

3.2.3 宽平稳过程的谱分解

定理3 若$\{X(t),-\infty<t<\infty\}$是均值为0且均方连续的宽平稳过程,则存在一均值为常数的正交增量过程$\{Y(\lambda),-\infty<\lambda<\infty\}$,使

$$X(t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\mathrm{i}\lambda t)Y(\mathrm{d}\lambda).$$

$\{Y(\lambda),-\infty<\lambda<\infty\}$决定一个满足$Y((\lambda_1,\lambda_2])=Y(\lambda_2)-Y(\lambda_1)$的正交随机测度,它由$\{X(t),-\infty<t<\infty\}$唯一决定,且对于任意$\lambda_1<\lambda_2$,有

$$E|Y(\lambda_2)-Y(\lambda_1)|^2=F(\lambda_2)-F(\lambda_1),$$

其中 F 是宽平稳过程 $\{X(t),-\infty<t<\infty\}$ 的谱函数.

定理 4 若 $\{X(n),n\in\mathbf{Z}\}$ 为零均值的宽平稳序列,则存在正交增量过程 $\{Y(\lambda),-\pi\leqslant\lambda\leqslant\pi\}$,使

$$X(n)=\int_{-\pi}^{\pi}\exp(\mathrm{i}\lambda t)Y(\mathrm{d}\lambda),$$

其中 $Y(\lambda)$ 在不计常值随机变量之差的意义下由 $\{X(n),n\in\mathbf{Z}\}$ 唯一决定,且满足

$$E(Y(\lambda_2)-Y(\lambda_1))=0$$

及

$$E|Y(\lambda_2)-Y(\lambda_1)|^2=F(\lambda_2)-F(\lambda_1)\qquad(\lambda_2>\lambda_1),$$

其中 $F(\lambda)$ 为 $\{X(n),n\in\mathbf{Z}\}$ 的谱函数.

例 1 自回归滑动平均序列(简称 ARMA 序列).

平稳序列 X 的谱函数 $F(\lambda)$ 绝对连续且有导数(称为谱密度),则

$$f(\lambda)=\frac{1}{2\pi}\left|\frac{\sum_{k=0}^{q}\beta_k\exp(-\mathrm{i}k\lambda)}{\sum_{j=0}^{p}\alpha_j\exp(-\mathrm{i}j\lambda)}\right|^2$$

称为有理谱密度,其中多项式 $\sum_{j=0}^{p}\alpha_jZ^j$ 与 $\sum_{k=0}^{q}\beta_kZ^k$,当 $|Z|\leqslant1$ 时不为 0. 这样的序列称为**自回归滑动平均序列**.它满足如下的随机差分方程:

$$\begin{aligned}&\alpha_0X(t)+\alpha_1X(t-1)+\cdots+\alpha_pX(t-p)\\&=\beta_0\xi(t)+\beta_1\xi(t-1)+\cdots+\beta_q\xi(t-q),\end{aligned}$$

其中 $\{\xi(t),t\in T\}$ 为正交随机序列,满足 $E\xi(t)\equiv0$;当 $t\neq s$ 时,

$$E\xi(t)\overline{\xi(s)}=0,E|\xi(t)|^2=1.$$

对于 T 是连续参数集的情形,相应的有理谱密度的形式为

$$f(\lambda)=\frac{1}{2\pi}\left|\frac{\sum_{k=0}^{q}\beta_k(\mathrm{i}\lambda)^k}{\sum_{j=0}^{p}\alpha_j(\mathrm{i}\lambda)^j}\right|^2,$$

其中 $q<p$,且多项式 $\sum_{j=0}^{p}\alpha_jZ^j$ 与 $\sum_{k=0}^{q}\beta_kZ^k$ 当 Z 有非负实部时不为 0.

从物理上看,上述性质表明,具有有理谱密度的平稳过程可以看成白噪声(即具有常值谱密度的平稳过程)输入一个有限阶非时变线性系统时所得的输出.这一特性使得它们在实际应用中占有重要的地位.

3.2.4 宽平稳过程的均方遍历性

定理 5 设 $\{X(t),-\infty<t<\infty\}$ 为均方连续的平稳过程,则

$$\lim_{t\to\infty}E\left|\frac{1}{2t}\int_{-t}^{t}X(s)\mathrm{d}s-m\right|^2=0$$

的充分必要条件是$\{X(t), -\infty < t < \infty\}$的谱函数$F(\lambda)$在$\lambda = 0$处连续，其中$m = EX(t)$，为过程的均值.

定理6 设$\{X(n), n \in \mathbf{Z}\}$为宽平稳序列，则

$$\lim_{n \to \infty} \frac{1}{2N+1} \sum_{t=-N}^{N} X(t) = m$$

的充分必要条件为该序列的谱函数$F(\lambda)$在$\lambda = 0$处连续

3.2.5 宽平稳过程的线性预测

对于一个均值为0的宽平稳过程$X = \{X(t), t \in T\}$，随机变量集$\{X(s), s \in T, s \leq t\}$表示到时刻$t$为止所能观测到的过程的历史，用$M_t(X)$表示由这些随机变量的一切有限线性组合及其均方极限所构成的希尔伯特(D. Hilbert)空间.

设$\tau > 0$，所谓"τ步"线性预测，就是要用$M_t(X)$中的随机变量来估计还未曾观测的$X(t+\tau), t+\tau \in T$；而线性最优预测，就是要在$M_t(X)$中选择$\hat{X}(t,\tau)$，使预测误差的二阶矩

$$\sigma_\tau^2 = E \mid X(t+\tau) - \hat{X}(t,\tau) \mid^2$$

达到最小. 可以证明$\hat{X}(t,\tau)$唯一存在，它就是$X(t+\tau)$在空间$M_t(X)$上的投影. 如果对于任意的$t, s \in T$，都有$M_t(X) = M_s(X)$，则称过程为决定的或奇异的，这时$\sigma_\tau^2 = 0$，即可以无误差地进行预测. 如果所有$M_t(X)$的公共部分仅包含零，即$\bigcap_{t \in T} M_t(X) = \{0\}$，则过程为纯非决定的或正则的.

一般的宽平稳过程X可以分解成相互正交的两部分之和：

$$X = X^r + X^s,$$

其中X^r是纯非决定的宽平稳过程，X^s是决定的宽平稳过程. 这时，X^r可以按离散参数或连续参数分别表示为一个正交随机序列$\{\xi(t), t \in T\}$的向后的滑动和，即

$$X^r(t) = \sum_{s=-\infty}^{t} \beta(t-s)\xi(s);$$

或一个正交增量过程$\{\xi(t), t \in T\}$的向后的滑动积分(对正交增量过程的积分)，即

$$X^r(t) = \int_{-\infty}^{t} \beta(t-s) \mathrm{d}\xi(s),$$

而且对于任何$t \in T$，有

$$M_t(X^r) = M_t(\xi).$$

宽平稳过程的这一分解称为沃尔德(A. Wald)分解. 由此，对于离散参数情形，可得

$$\hat{X}(t,\tau) = \sum_{s=-\infty}^{t} \beta(t+\tau-s)\xi(s) + X^s(t+\tau),$$

$$\sigma_\tau^2 = \sum_{s=0}^{\tau-1} \mid \beta(s) \mid^2;$$

对于连续参数情形，可得

$$\widehat{X}(t,\tau)=\int_{-\infty}^{t}\beta(t+\tau-s)\mathrm{d}\xi(s)+X^{r}(t+\tau),$$

$$\sigma_{\tau}^{2}=\int_{0}^{\tau}|\beta(s)|^{2}\mathrm{d}s.$$

此外,宽平稳过程 X 本身为纯非决定的充分必要条件是:它有谱密度 $f(\lambda)$,且满足

$$\int_{-\pi}^{\pi}\log f(\lambda)\mathrm{d}\lambda>-\infty \qquad (离散参数),$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\log f(\lambda)}{1+\lambda^{2}}\mathrm{d}\lambda>-\infty \qquad (连续参数).$$

具有有理谱密度的过程是纯非决定过程的重要特例.

3.3　严平稳过程

3.3.1　严平稳过程与保测变换

定义 7　取 $\mathscr{F}$ 的子 σ 代数 $\mathscr{E}$,考虑概率空间 $(\Omega,\mathscr{E},P)$,P 为完全测度.设 S 为把 $\mathscr{E}$ 中的集变到 $\mathscr{E}$ 中的集的变换,如果它满足下列条件,则称 $\mathscr{S}$ 为保测集变换:

1° 设 A_1 是 A 的像,则 A_2 也是 A 的像的充分必要条件是

$$P(A_1\triangle A_2)=0,$$

其中 $A_1\triangle A_2$ 是集合的对称差,即

$$A_1\triangle A_2=(A_1\setminus A_2)\bigcup(A_2\setminus A_1).$$

2° $P(A)=P(SA)$.

3° $P((S\bigcup_{n=1}^{\infty}A_n)\triangle(\bigcup_{n=1}^{\infty}SA_n))=0,\quad P(S(\Omega\setminus A)\triangle(\Omega\setminus SA))=0;$

记 $P(A\triangle B)=0$ 为 $A\approx B$.

对于每一保测集变换 S,存在唯一的随机变量的变换 S_1,具有下列性质:

1° 如 X_1 是 X 的像,则 X_2 也是 X 的像的充分必要条件是

$$P(X_1=X_2)=1;$$

2° 如 $X=I_A$,则

$$P(S_1X=I_{SA})=1;$$

3° S_1 是线性的,对于任意二常数 a,b,

$$S_1(aX+bY)=aS_1X+bS_1Y \qquad (\text{a.s.});$$

4° S_1 是连续的,如果 $\lim\limits_{n\to\infty}X_n=X$,a.s.,则

$$\lim_{n\to\infty}S_1X_n=S_1X \qquad (\text{a.s.}).$$

S 与 S_1 同记为 S 并统称为**保测变换**.如果每一 $\mathscr{E}$ 可测集 B 都是某 $\mathscr{E}$ 可测集 A 在变换 S 之下的像,则可定义逆变换 S^{-1}.此时还可定义 S^k,使 $S^k=S(S^{k-1})=S^{k-1}(S)$,$k>0$,记 $S^0=I$(恒等变换).

定理 7　设 S 为保测变换,X_0 为任意随机变量,则

$$\{X_n, n \geqslant 0\} \qquad (X_n = S^n X_0, \text{a.s.})$$
是一平稳序列．反之，若$\{X_n, n \geqslant 0\}$为平稳序列，则必存在唯一的保测变换S，它定义在$\sigma(X_n, n \geqslant 0)$上，使
$$X_n = S^n X_0 \qquad (n = 0,1,2,\cdots).$$

定义 8　若在完全化概率空间$(\Omega, \mathscr{F}, P)$上给定保测变换集$\{S_t, t \in T\}$，则称它为保测变换群，如对于任意的$s, t, s+t \in T$，有
$$S_{s+t}A \approx S_t S_s A \approx S_s S_t A, \quad S_0 A = A.$$
当$T = [0, \infty)$时，只考虑$s, t \geqslant 0$，则称为保测变换半群．

定理 8　若$\{S_t, t \in T\}$为保测集变换群（半群），X_0为任一随机变量，则
$$\{X_t, t \in T\} \qquad (X_t = S_t X_0, \text{a.s.})$$
是平稳过程．反之，若$\{X(t), t \in T\}$为任一平稳过程，则必存在唯一的保测变换群（相应地，半群）$\{S_t, t \in T\}$，它定义在$\sigma(X(t), t \in T)$上，使得
$$X(t) = S_t X(0) \qquad (\text{a.s.}, t \in T).$$

3.3.2　严平稳过程的遍历定理

对严平稳过程来说，其最重要的性质是以概率1成立的遍历定理，或称为**各态历经定理**．

定理 9　用$\mathscr{U}$表示使$S_t A \approx A$对于任何$t \in T$都成立的事件A的全体，则$\mathscr{U}$是$\mathscr{F}$的子σ域（称为不变σ域）．这里$\{S_t, t \in T\}$是与过程$\{X(t), t \in T\}$相应的保测变换群（或半群）．于是，有
$$\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N+1} \sum_{t=0}^{N} X(t) = E(X(0) \mid \mathscr{U}) \qquad (\text{a.s.，离散参数情形}),$$
$$\lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} \int_0^t X(s)\,\mathrm{d}s = E(X(0) \mid \mathscr{U}) \qquad (\text{a.s.，连续参数情形}).$$

如果平稳过程$\{X(t), t \in T\}$的不变σ域中的任一元A的概率只取0或1，则称过程是遍历的，此时
$$E(X(0) \mid \mathscr{U}) = EX(0),$$
对过程按时间平均等于对概率测度取平均．遍历性成立．

4　布朗运动

1927年，英国植物学家布朗观察到悬浮在液体中的微粒子作不规则的运动．这种运动的数学抽象，就叫做布朗运动，又称为维纳过程．1905年，爱因斯坦求出了粒子的转移密度．1923年，维纳从数学上严格地定义了一个随机过程来描述布朗运动．

布朗运动的起因是液体的所有分子都处在运动中，且相互碰撞，从而粒子周围有大量分子以微小但起伏不定的力共同作用于它，使它被迫作不规则运动．

若以 $X(t)$ 表示粒子在时刻 t 所处位置的一个坐标，且液体是均匀的，自然设想自时刻 t_1 到 t_2 的位移 $X(t_2)-X(t_1)$ 是许多几乎独立的小位移之和，因而根据中心极限定理，可以合理地假定 $X(t_2)-X(t_1)$ 服从正态分布，而且对于不同时间段的位移，应该是相互独立的. 这些物理上的考虑引出了下面的数学定义.

4.1　布朗运动的数学定义

定义 1　设 $\boldsymbol{X}=\{\boldsymbol{X}(t),t\in\mathbf{R}_+\}$ 为定义在概率空间 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 上取值于 d 维实空间 $\mathbf{R}^d$ 中的随机过程，若满足

1° $\boldsymbol{X}(0)=0$,

2° 独立增量性　对于任意的 $0\leqslant t_0<t_1<t_2<\cdots<t_n$，$\boldsymbol{X}(t_0),\boldsymbol{X}(t_1)-\boldsymbol{X}(t_0),\boldsymbol{X}(t_2)-\boldsymbol{X}(t_1),\cdots,\boldsymbol{X}(t_n)-\boldsymbol{X}(t_{n-1})$ 是相互独立的随机向量，

3° 对于任意 $s\geqslant 0,\tau>0$，增量 $\boldsymbol{X}(s+\tau)-\boldsymbol{X}(s)$ 服从密度为 $p(\tau,x)=(2\pi\tau)^{-d/2}\exp\left(-\frac{|x|^2}{2\tau}\right)$ 的 d 维正态分布，其中 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_d)^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^d$，$|\boldsymbol{x}|=\left(\sum_{k=1}^{d}\boldsymbol{x}_k^2\right)^{1/2}$ 表示 $\boldsymbol{x}$ 到原点的距离，

4° $\boldsymbol{X}$ 的一切样本函数连续，

则这样的过程 $\boldsymbol{X}$ 称为(标准) 布朗运动或(标准) 维纳过程.

维纳证明了满足 1° ~ 4° 的过程的存在性. 这样的过程 X 是独立增量过程，因而是马尔可夫过程，而且还是鞅(见下章) 和正态过程. 其均值函数是一个各分量恒等于零的 d 维向量函数，$\boldsymbol{EX}(t)=0$；其协方差阵函数

$$\boldsymbol{EX}(t)\boldsymbol{X}(s)^{\mathrm{T}}=(s\wedge t)\boldsymbol{I}_d,$$

其中 $\boldsymbol{I}_d$ 是 d 阶单位方阵；$s\wedge t$ 表示 s,t 中较小的数；$\boldsymbol{X}(s)^{\mathrm{T}}$ 是随机向量 $\boldsymbol{X}(s)$ 的转置.

现在考虑 $d=1$ 的情形. 作为马尔可夫过程，维纳过程是具有转移密度

$$P(t,x,y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\exp\left(-(y-x)^2\frac{1}{2t}\right)$$

的齐次马尔可夫过程. 其转移函数 $P(t,x,\Gamma)$ 在相空间中是平移不变的：

$$P(t,x+y,\Gamma)=P(t,x,\Gamma-y),$$

其中 $\Gamma-y$ 表示集合 $\{z:z+y\in\Gamma\}$.

维纳过程是离散时间质点的随机游动的连续类比. 设已给维纳过程 $\{X(t),0\leqslant t\leqslant 1\}$，任取自然数 n，令

$$X_n(t)=\sum_{k=0}^{[nt]-1}\left(X\left(\frac{k+1}{n}\right)-X\left(\frac{k}{n}\right)\right)+$$
$$(nt-[nt])\left(X\left(\frac{[nt]+1}{n}\right)-X\left(\frac{[nt]}{n}\right)\right)\quad\left(0\leqslant t\leqslant\frac{n-1}{n}\right),$$

$$X_n(t)=\sum_{k=0}^{nt-1}\left(X\left(\frac{k+1}{n}\right)-X\left(\frac{k}{n}\right)\right)+$$

$$(nt-[nt])\left(X(1)-X\left(\frac{[nt]}{n}\right)\right) \qquad \left(\frac{n-1}{n}<t\leqslant 1\right),$$

其中$[nt]$是nt的整数部分，则$X_n(t)$是质点在离散时刻$k\frac{1}{n}$随机位移一个与过去独立的量$X\left(\frac{k+1}{n}\right)-X\left(\frac{k}{n}\right)$，其中

$$E\left(X\left(\frac{k+1}{n}\right)-X\left(\frac{k}{n}\right)\right)=0,$$

方差

$$\operatorname{var}\left(X\left(\frac{k+1}{n}\right)-X\left(\frac{k}{n}\right)\right)=\frac{1}{n}.$$

如果P_n是在连续函数空间$C[0,1]$上的概率分布，则维纳过程轨道的概率分布可以看做是P_n当$n\to\infty$时弱收敛的极限.

作为一个取值在希尔伯特空间$L_2(\Omega,\mathscr{F},P)$(一切具有$EX^2<\infty$的随机变量构成的空间，其内积由公式$\langle X_1,X_2\rangle=EX_1X_2$定义)上的函数，维纳过程$X=\{X(t),0\leqslant t\leqslant 1\}$可以规范地表示为

$$X(t)=\sum_{k=0}^{\infty}E_k\sin\left(\frac{\pi}{2}(2k+1)t\right) \qquad (0\leqslant t\leqslant 1),$$

其中Z_k是具有$EZ_k=0,\operatorname{var}Z_k=1\Big/\left(\frac{\pi}{2}(2k+1)\right)^2$的独立正态变量.此级数既是$L_2$收敛，也是几乎处处收敛.

4.2　布朗运动样本函数的性质

布朗运动的样本函数很具特色.如果$\{X(t),t\geqslant 0\}$是一维布朗运动，尽管它的所有轨道是连续的，但是它的几乎所有的样本函数具有如下性质.

1° 处处不可微.

2° 在任一区间中非有界变差，当然更不单调.

3° 局部极大点在$[0,\infty)$上形成可列稠集，而且每一个局部极大值都是严格极大的.

4° 二次变差$\sum_{i=1}^{m}|X(t_i^{(n)})-X(t_{i-1}^{(n)})|^2$，当区间$[0,t]$的加密分割$0<t_0^{(n)}<t_1^{(n)}<t_2^{(n)}<\cdots<t_m^{(n)}=t$的直径$\max\limits_{1\leqslant k\leqslant m}[t_k^{(n)}-t_{k-1}^{(n)}]$趋于0时，以概率1收敛到$t$.

5° 零点集$S_0(\omega)=\{t\geqslant 0:X(t,\omega)=0\}$是勒贝格测度为零的无界完全集.

6° X限于区间$[0,1]$上的轨道在$C[0,1]$中具有下述意义的稠密性：对于任给$[0,1]$上的一个满足$f(0)=0$的连续函数f和任给$\varepsilon>0$，总有

$$P(\max_{0\leqslant t\leqslant 1}|X(t)-f(t)|\leqslant\varepsilon)>0.$$

维纳过程的轨道满足下述重对数律：

$$\limsup_{h\to 0}\frac{X(h)}{\sqrt{2h\ln\ln\frac{1}{h}}}=1,$$

对维纳过程$\{X(t),t\geqslant 0\}$作下述变换仍为维纳过程：

(1) 对于 $c>0$，　$X_1(t)=CX(t/c^2)$；

(2) $$X_2(t)=\begin{cases}tX(1/t) & (t>0),\\ 0 & (t=0);\end{cases}$$

(3) 对于 $h>0$，
$$X_3(t)=X(t+h)-X(h);$$

(4) $$X_4(t)=-X(t).$$

由此可得重对数律的另一形式：

$$\limsup_{t\to\infty}\frac{X(t)}{\sqrt{2t\ln\ln t}}=1.$$

4.3　几个重要的分布

布朗运动的最大值，布朗质点首达一固定点 x 的首达时间 τ_x，以及在布朗质点的运动中首次见到值 $\max\limits_{0\leqslant s\leqslant t}X(s)$ 的时刻 τ_s 的分布，深刻地刻画了布朗质点运动的性质．这些分布可用下列公式给出：

$$P(\max_{0\leqslant s\leqslant t}X(s)\geqslant x)=\frac{2}{\sqrt{2\pi t}}\int_x^{\infty}\exp(\frac{-u^2}{2t})\mathrm{d}u,$$

$$P(\tau_x\geqslant t)=P(\max_{0\leqslant s\leqslant t}X(s)\leqslant x)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^{x/\sqrt{t}}\exp(\frac{-u^2}{2})\mathrm{d}u$$

$$(0<t<\infty,0\leqslant x<\infty).$$

由于在相空间的变换 $x\to -x$ 下，布朗运动的分布律保持不变，从而布朗运动的最小值分布具有与最大值分布对称的性质．

最大值点 $\tau(0\leqslant\tau\leqslant t)$ 和最大值 $\max\limits_{0\leqslant s\leqslant t}X(s)$ 本身的联合分布具有概率密度

$$p(s,x)=\frac{1}{\pi\sqrt{s(t-s)}}\frac{x}{s}\exp(-\frac{x^2}{2s})\qquad(0<s<t,0\leqslant x<\infty);$$

而 τ 本身按反正弦律分布，即

$$P(\tau\leqslant s)=\frac{2}{\pi}\arcsin\sqrt{\frac{s}{t}}\qquad(0\leqslant s\leqslant t),$$

且具有概率密度

$$p(s)=\frac{1}{\pi\sqrt{s(t-s)}}\qquad(0<s<t).$$

由上述公式还能得到布朗运动的下述性质：

从任意点 x 开始其运动轨道以概率 1 在短时间 δ 内穿过“水平”x 无穷多次；布朗轨道以概率 1 通过所有的点 x（即 $P(\tau_x<\infty)=1$）；对于大的 x，τ_x 的最可能值

与 x^2 同阶. 如果考虑固定区间$[0,t]$,则轨道往往在接近上端点 $s=0$ 和 $s=t$ 处达到其极值.

4.4 布朗运动的各种变化

4.4.1 在一个值处被吸收的布朗运动

定义 2 设$\{X(t),t\in[0,\infty)\}$为布朗运动,若 τ_x 为首次击中x的时刻,$x>0$,记

$$Z(t)=\begin{cases}X(t) & (t<\tau_x),t\in[0,\infty),\\ x & (t\geqslant\tau_x),\end{cases}$$

则$\{Z(t),t\geqslant 0\}$是击中 x 后永远停留在那里的布朗运动.

$Z(t)$ 的分布既有离散部分,又有连续部分:

$$P(Z(t)=x)=P(\tau_x\leqslant t)=\frac{2}{\sqrt{2\pi t}}\int_x^{\infty}\exp(-y^2/2t)\mathrm{d}y;$$

当 $y<x$ 时,

$$\begin{aligned}P(Z(t)\leqslant y)&=P(X(t)\leqslant y,\max_{0\leqslant s\leqslant t}X(s)<x)\\&=P(X(t)\leqslant y)-P(X(t)\leqslant y,\max_{0\leqslant s\leqslant t}X(s)>x)\\&=P(X(t)\leqslant y)-P(X(t)\geqslant 2x-y)\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\int_{y-2x}^{y}\exp(-\frac{u^2}{2t})\mathrm{d}u.\end{aligned}$$

4.4.2 在原点反射的布朗运动

定义 3 设$\{X(t),t\geqslant 0\}$是布朗运动,则过程

$$Z(t)=|X(t)|\qquad(t\geqslant 0),$$

称为在原点反射的布朗运动,其分布函数为

$$P(Z(t)\leqslant y)=\frac{2}{\sqrt{2\pi t}}\int_{-\infty}^{y}\exp(-\frac{2x^2}{2t})\mathrm{d}x-1\qquad(y>0),$$

$$EZ(t)=\sqrt{\frac{2t}{\pi}},$$

$$\mathrm{var}Z(t)=(1-\frac{2}{\pi})t.$$

4.4.3 几何布朗运动

定义 4 设$\{X(t),t\geqslant 0\}$是布朗运动,则由

$$Y(t)=\exp((r+\frac{\sigma^2}{2})t+\sigma X(t))\qquad(t\geqslant 0,r,\sigma>0)$$

定义的过程称为几何布朗运动.

这个过程的期望与方差分别为：

$$EY(t) = \exp((r+\sigma^2)t),$$

$$\mathrm{var}Y(t) = \exp((2r+\frac{3\sigma^2}{2})t) - \exp(2(r+\sigma^2)t).$$

当所处理的模型百分比变化（不是绝对量的变化）是独立同分布时，可用几何布朗运动描述.

例1 股票期权的价值.设某人拥有在将来时刻 T 以固定价格 k 购买一股某种股票的期权，假设该股票目前价格为 y，且其价格按几何布朗运动变化.若时刻 T 的股票价格是 k 或更高，则期权将被实施，否则将会放弃.因此它的平均价值为

$$\begin{aligned} E(\max(Y(T)-k,0)) &= \int_0^{\infty} P(Y(T)-k>a)\mathrm{d}a \\ &= \int_0^{\infty} P(\exp((r+\frac{\sigma^2}{2})T+\sigma Y(T))-k>a)\mathrm{d}a \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi T}}\int_0^{\infty}\int_g^{\infty}\exp(-\frac{x^2}{2T})\mathrm{d}x\mathrm{d}a, \end{aligned}$$

其中

$$g = \frac{\log(k+a)-(r+\frac{\sigma^2}{2})T}{\sigma}.$$

4.4.4 积分布朗运动

定义5 设 $\{X(t), t\geq 0\}$ 是布朗运动，则由

$$Z(t) = \int_0^t X(s)\mathrm{d}s \qquad (t\geq 0)$$

定义的过程 $\{Z(t), t\geq 0\}$ 称为积分布朗运动.

设某种商品价格的变化率是布朗运动，则该商品的价格就是积分布朗运动.它仍是正态过程，

$$E(Z(t)) = E\int_0^t X(s)\mathrm{d}s = \int_0^t EX(s)\mathrm{d}s = 0,$$

$$\mathrm{cov}[Z(s),Z(t)] = s^2\left(\frac{t}{2}-\frac{s}{6}\right) \qquad (0<s\leq t).$$

但注意 $\{Z(t), t\geq 0\}$ 本身不是马尔可夫过程，而向量过程 $\{(Z(t), X(t)), t\geq 0\}$ 是马尔可夫过程.

设价格的变化率与价格之比遵循一个布朗运动，可得另一种形式的积分布朗运动.以 $W(t)$ 记 t 时的价格，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t) = X(t)W(t),$$

即

$$W(t) = W(0)\exp\left(\int_0^t X(s)\mathrm{d}s\right),$$

其中 $\{X(t), t\geq 0\}$ 是布朗运动.取 $W(0)=1$，则

$$W(t) = \exp Z(t) \qquad (t\geq 0),$$

其期望为

$$EW(t) = \exp(\frac{t^2}{6}) \qquad (t \geqslant 0).$$

4.4.5 有漂移的布朗运动

定义 6 称$\{X(t), t \geqslant 0\}$为具有漂移系数μ的布朗运动，如果$X(t) = \mu t + B(t)$，其中$\{B(t), t \geqslant 0\}$为标准布朗运动.

对于有漂移的布朗运动，可考虑如下概率：

$$\begin{aligned} P(x) &= P\{X(t)\text{ 在击中 } -B \text{ 之前击中 } A : X(0) = x\} \\ &= \frac{\exp(2\mu B) - \exp(-2\mu x)}{\exp(2\mu B) - \exp(-2\mu A)}, \end{aligned}$$

其中$A, B > 0$，因此从$X(0) = 0$出发，

$$P(\text{过程在下降 } B \text{ 之前先上升 } A) = \frac{\exp(2\mu B) - 1}{\exp(2\mu B) - \exp(-2\mu A)}.$$

若$\mu < 0$，则令$B \to \infty$，

$$P(\text{过程迟早上升 } A) = \exp(2\mu A),$$

从

$$P(\text{布朗运动在下降 } B \text{ 之前上升 } A) = \frac{B}{A + B}.$$

设有漂移μ的布朗运动的转移密度函数为$p(t, x, y)$，则它满足如下方程：

向后扩散方程

$$\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} p(t, x, y) + \mu \frac{\partial}{\partial x} p(t, x, y) = \frac{\partial}{\partial t} p(t, x, y),$$

向前扩散方程

$$\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} p(t, x, y) = \mu \frac{\partial}{\partial y} p(t, x, y) + \frac{\partial}{\partial t} p(t, x, y).$$

这里，

$$p(t, x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp(-\frac{1}{2t}(y - (x + \mu t))^2).$$

4.5 布朗桥过程

4.5.1 布朗桥过程的定义

定义 7 设$\{X(t), t \geqslant 0\}$为布朗运动，称条件随机过程$\{X(t), 0 \leqslant t \leqslant 1 \mid X(1) = 0\}$为布朗桥过程. 它是正态过程，对于$s < 1$，

$$E(X(s) \mid X(1) = 0) = 0;$$

对于$0 < s < t < 1$，

$$\operatorname{cov}((X(s), X(t)) \mid X(1) = 0) = s(1 - t).$$

即布朗桥过程为均值等于0、协方差函数为$s(1 - t), s \leqslant t$的正态过程.

等价地，可定义布朗桥过程如下：若$\{X(t), t \geqslant 0\}$为布朗运动，则$Z(t) =$

$X(t)-tX(1)$ 时，$\{Z(t),t\geq 0\}$ 是布朗桥过程.

4.5.2 布朗桥过程与经验分布

设 $X_1,X_2,\cdots$ 为$(0,1)$上均匀分布的随机变量，定义 $N_n(s)$ 为前 n 个变量中小于或等于 s 的个数，即

$$N_n(s)=\sum_{i=1}^{n}I_{[0,s]}(X_i)\qquad(0\leq s\leq 1),$$

随机函数 $F_n(s)=\dfrac{N_n(s)}{n}$，$0\leq s\leq 1$，称为 X_i 的经验分布函数.

当 $n\to\infty$ 时，以概率 1，$F_n(s)\to s$. 由格利文科 - 坎泰利(Glivenko-Cantelli)定理还可得更强的结论：

$$\sup_{0\leq s\leq 1}|F_n(s)-s|\to 0\qquad(\text{a.s.},n\to\infty).$$

而过程$\{\sqrt{n}(F_n(s)-s),0\leq s\leq 1\}$ 的极限过程$(n\to\infty)$正是布朗桥过程.

若 X_i 是一般的随机变量，且有连续的分布函数，则定义

$$N_n(x)=\sum_{i=1}^{n}I_{(-\infty,x]}(X_i),$$

$$F_n(x)=\frac{N_n(x)}{n}.$$

设 $F(x)$ 是 $X_1,X_2,\cdots$ 的共同分布，令

$$\begin{aligned}a_n(s)&=\sqrt{n}((X_i,i=1,2,\cdots,n\text{ 中使 }F(X_i)\leq s\text{ 的个数})/n-s)\\&=\sqrt{n}(F_n(F^{-1}(s))-s)),\end{aligned}$$

则$\{a_n(s),0\leq s\leq 1\}$ 收敛于布朗桥过程. 所以

$$\lim_{n\to\infty}P(\sqrt{n}\sup_x|F_n(x)-F(x)|\leq a)=P(\max_{0\leq t\leq 1}|Z(t)|\leq a),$$

其中$\{Z(t),0\leq t\leq 1\}$ 为布朗桥过程.

4.6 多维布朗运动的常返性与非常返性

多维布朗运动有一个依赖于维数的有趣性质，这就是常返性. 当 $d=1,2$ 时，布朗运动是常返的，即从任何一点 $a\in\mathbf{R}^d$ 出发，且任意指定一个 a 的邻域A，则过程或迟或早返回 A 的概率等于 1. 当 $d\geq 3$时，不再有此性质，这时自 a 出发作布朗运动的粒子将以概率 1 趋于无穷，即

$$P(\lim_{t\to\infty}|X_a(t)|=\infty)=1,$$

其中

$$X_a(t)=a+X(t),$$

表示自 a 出发的布朗运动. 因而自某一时刻以后，粒子不再回到 a 的附近，而且 $d(d\geq 3)$ 越大，粒子趋于无穷的速度也越快.

设 B_r 是以 O 为中心，以 r 为半径的球，定义粒子最后一次离开 B_r 的时刻为λ_r

$=\sup\{t>0: X(t)\in B_r\}$，$\lambda_r$ 称为 B_r 的"末离时"，则从 O 出发的布朗运动 X，其粒子首达 B_r^c 的点与末离 B_r 的点在球面上都有相同的均匀分布，λ_r 的概率密度函数为

$$f_d(t)=\frac{r^{d-2}}{2^{\frac{d}{2}-1}\Gamma\left(\frac{d}{2}-1\right)}t^{-\frac{d}{2}}\exp\left(-\frac{r^2}{2t}\right)\qquad(t>0,d\geqslant 3).$$

由此可知 $E\lambda_\sigma^m<\infty$ 的充分必要条件是 $m<\frac{d}{2}-1$. 这时

$$E\lambda_r^m=\frac{r^{2m}}{(d-4)(d-6)\cdots(d-2m-2)}.$$

因此，当 $d=3,4$ 时，λ_r 各阶矩不存在；$d=5,6$ 时，均值有限，方差无穷；等等. 这说明 d 越大，粒子越快地离开球 B_r.

4.7 布朗运动与狄利克雷问题

$d(d\geqslant 2)$ 维布朗运动与拉普拉斯(P.S.Laplace)算子 $\Delta=\sum_{i=1}^{d}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ 有密切联系，从而使著名的狄利克雷问题可以用概率方法求解.

设 D 为有界区域，它的边界 ∂D 充分光滑. 在 ∂D 上给定连续函数 $g(x)$，求拉普拉斯方程 $\Delta h=0$ 在区域内的唯一解，使其满足边界条件 $h(x)=g(x)$，$x\in\partial D$（$h(x)$ 要在 D 的闭包 $\overline{D}$ 上连续）. 这个问题即称为**狄利克雷问题**.

记 D 的补集为 D^c，设 $X(t)$ 为布朗运动，对于任何 $x\in D$，令 $\tau_x=\inf\{t>0: x+X(t)\in D^c\}$，它是从 x 点出发的布朗运动的粒子首达 D^c 的时刻，$x+X(\tau_x)$ 是粒子首达 D^c 的点，则

$$h(x)=Eg(x+X(\tau_x))\qquad(x\in D),$$

就是上述狄利克雷问题的唯一解.

这一例子反映的布朗运动与古典位势之间的关系是普遍存在的，近年来又研究了一般马尔可夫过程与现代位势理论之间的联系.

5 离 散 鞅

鞅的概念是现代概率论中最重要的概念之一. 它是马尔可夫过程论和随机积分论的基础，并且用在分析理论的许多部分. 本章主要讨论离散时间鞅.

5.1 定义及简单性质

设已给概率空间 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 及参数集 T. 在离散情况下取 $T=\{0,1,2,\cdots\}$；在连续情况下，取 $T=[0,\infty)$，并记 $\overline{T}=T\cup\{\infty\}$. 设在此概率空间有 $\mathscr{F}$ 的非减子 σ 域

族$\{\mathscr{F}_t, t \in T\}$.

定义 1 设实随机过程 $X = \{X(t), t \in T\}$ 定义在$(\Omega, \mathscr{F}, P)$上,满足 $X(t) \in \mathscr{F}_t$, $E|X(t)| < \infty, t \in T$,如果

$$E(X(t) \mid \mathscr{F}_s) = X(s) \qquad (\text{a.s.}, \forall s \leqslant t, s, t \in T),$$

则称$\{X(t), t \in T\}$为$\{\mathscr{F}_t, t \in T\}$鞅,记作$\{X(t), \mathscr{F}_t, t \in T\}$鞅.

如果在 $E(X(t) \mid \mathscr{F}_s) = X(s)$ 式中以"$\geqslant$"代替"$=$",则$\{X(t), \mathscr{F}_t, t \in T\}$称为下鞅;而以"$\leqslant$"代替"$=$",则称为上鞅.

例 1 如果 $\xi_1, \xi_2, \cdots$ 是具有 $E\xi_n = 0, n \geqslant 1$ 的独立随机变量序列,$\mathscr{F}_n = \sigma(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n)$ 是由 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n$ 生成的σ代数,令 $X_n = \xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n$,则$\{X_n, \mathscr{F}_n, n \geqslant 1\}$是鞅.如果 $E\xi_n \geqslant 0, n \geqslant 1$,则$\{X_n, \mathscr{F}_n, n \geqslant 1\}$是下鞅.

例 2 设 $Y = \{Y_n, \mathscr{F}_n, n \geqslant 1\}$是鞅(下鞅),$V = \{V_n, \mathscr{F}_n, n \geqslant 1\}$是可料序列(即 V_n 是 $\mathscr{F}_{n-1}$ 可测的,$n \geqslant 1$),$\mathscr{F}_0 = \{\varnothing, \Omega\}$.令

$$(V \cdot Y)_n = V_1 Y_1 + \sum_{k=2}^{n} V_k (Y_k - Y_{k-1}) \qquad (n \geqslant 1).$$

如果变量$(V \cdot Y)_n$是可积的,则$\{(V \cdot Y)_n, \mathscr{F}_n, n \geqslant 1\}$形成一个鞅(相应地,如果 $V_n \geqslant 0$,则形成下鞅).特别地,如果 $\xi_1, \xi_2, \cdots$ 是服从伯努利(J. Bernoulli)分布的独立随机变量序列,$P(\xi_i = 1) = P(\xi_i = -1) = \dfrac{1}{2}$,设

$$Y_n = \xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n, \quad \mathscr{F}_n = \sigma(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n),$$

且

$$V_n = \begin{cases} 2^{n-1} & (\xi_1 = \xi_2 = \cdots = \xi_{n-1} = -1), \\ 0 & (\text{其他}), \end{cases}$$

则$\{(V \cdot Y)_n, \mathscr{F}_n, n \geqslant 1\}$是一个鞅.这一随机过程是一赌博的数学模型,其中,$\xi_n = 1$,表示第 n 局赌博者赢;$\xi_n = -1$,表示第 n 局赌博者输;V_n 是第 n 局赌博者下的赌注.以上定义的 V_n 表示当赌博者输的时候,他加倍下赌注,当他第一次赢的时候停止赌博.在西方赌博界这种赌法称为鞅法,这亦是这一数学术语的来源.

例 3 设$\{X(t), t \geqslant 0\}$是标准布朗运动,$\mathscr{F}_t = \sigma(X(s), s \leqslant t)$,则下述诸过程是鞅:

(1) $\{X(t), \mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$;

(2) $\{X^2(t) - t, \mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$;

(3) $\{\exp(\lambda X(t) - \dfrac{1}{2}\lambda^2 t), \mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$.

定理 1 设$\{X(t), \mathscr{F}_t, t \in T\}$和$\{Y(t), \mathscr{F}_t, t \in T\}$是鞅(下鞅),则

1° $\{X(t) + Y(t), \mathscr{F}_t, t \in T\}$是鞅(相应地,为下鞅);

2° $\{X(t) \vee Y(t), \mathscr{F}_t, t \in T\}$是下鞅.

由于若$\{X(t), \mathscr{F}_t, t \in T\}$是上鞅,则$\{-X(t), \mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$是下鞅,因而一般只讨论下鞅.

定理 2 (1) 若$\{X(t), \mathscr{F}_t, t \in T\}$是鞅,$f$是定义在 $\mathbf{R}$ 上的凸函数,且对于一切 $t \in T$, $E|f(X(t))| < \infty$,则$\{f(X(t)), \mathscr{F}_t, t \in T\}$是下鞅.

(2) 若$\{X(t),\mathscr{F}_t,t\in T\}$是下鞅,$f$是定义在$\mathbf{R}$上的非减凸函数,且对于一切$t\in T$,$E|f(X(t))|<\infty$,则$\{f(X(t)),\mathscr{F}_t,t\in T\}$为下鞅.

例 4 设$\{X_t,\mathscr{F}_t,t\in T\}$是鞅(或非负下鞅),$\lambda\geqslant 1$为一常数,如果对于一切$t\in T$,$|X_t|^\lambda$可积,则$\{|X_t|^\lambda,\mathscr{F}_t,t\in T\}$是下鞅.

5.2 离散鞅的基本不等式

鞅的一个基本事实是:鞅(下鞅)在随机时间变换下仍然保持其结构.这就是下述的称之为**杜布停时定理**(或可选抽样定理)的内容.

定理 3 设$\{X_t,\mathscr{F}_t,t\in T\cup\{\infty\}\}$为鞅,$\tau_1,\tau_2$为两个$\{\mathscr{F}_t,t\in T\}$停时,满足$P(\tau_1\leqslant\tau_2)=1$,且

$$E|X_{\tau_i}|<\infty \qquad (i=1,2),$$

则

$$E(X_{\tau_2}|\mathscr{F}_{\tau_1})=X_{\tau_1} \qquad (\text{a.s.},在鞅的情形),$$

$$E(X_{\tau_2}|\mathscr{F}_{\tau_1})\geqslant X_{\tau_1} \qquad (\text{a.s.},在下鞅的情形),$$

其中$\mathscr{F}_{\tau_1}=\{A\in\mathscr{F}:A\cap\{\tau_1\leqslant t\}\in\mathscr{F}_t,\forall t\in T\}$.

定理 4 (杜布不等式) 如果$\{X_n,\mathscr{F}_n,n\geqslant 1\}$是非负下鞅,记

$$X_n^*=\max_{1\leqslant j\leqslant n}X_n,$$

$$\|X_n\|_p=(E|X_n|^p)^{1/p} \qquad (p\geqslant 1,n\geqslant 1),$$

则

$$P(X_n^*\geqslant\varepsilon)\leqslant\frac{EX_n}{\varepsilon},$$

$$\|X_n\|_p\leqslant\|X_n^*\|_p\leqslant\frac{p}{p-1}\|X_n\|_p \qquad (p>1),$$

$$\|X_n^*\|_p\leqslant\frac{\mathrm{e}}{\mathrm{e}-1}(1+\|X_n\ln^+X_n\|_p) \qquad (p=1),$$

其中$\ln^+X_n$表示函数的正部,即$\ln^+X_n=\begin{cases}X_n & (若\ X_n\geqslant 0),\\ 0 & (X_n<0).\end{cases}$

定理 5 (布克霍德(D.L.Burkholder)不等式) 如果$\{X_n,\mathscr{F}_n,n\geqslant 1\}$是鞅,则对于$p>1$,不等式

$$A_p\|\sqrt{[X]_n}\|_p\leqslant\|X_n\|_p\leqslant B_p\|\sqrt{[X]_n}\|_p$$

成立,其中

$$A_p=\left(\frac{18p^{3/2}}{p-1}\right)^{-1}, \qquad B_p=\frac{18p^{3/2}}{(p-1)^{1/2}},$$

是不依赖于X和n的普适常数,而

$$[X]_n=\sum_{i=1}^n(X_i-X_{i-1})^2 \qquad (X_0=0,n\geqslant 1).$$

由上述不等式可知,当 $p > 1$ 时,

$$A_p \| \sqrt{[X]_n} \|_p \leqslant \| X_n^* \|_p \leqslant \widetilde{B}_p \| \sqrt{[X]_n} \|_p,$$

其中

$$\widetilde{B}_p = \frac{18p^{5/2}}{(p-1)^{3/2}}.$$

当 $p = 1$ 时,上述不等式还可以推广成戴维斯(M. Davis)不等式,即存在普适常数 A 和 B,使

$$A \| \sqrt{[X]_n} \|_1 \leqslant \| X_n^* \|_1 \leqslant B \| \sqrt{[X]_n} \|_1.$$

上述两个不等式中的 X_n^* 应定义为 $\max\limits_{0 \leqslant k \leqslant n} |X_k|$.

在关于下鞅以概率 1 收敛的各种定理证明中,起关键作用的是下鞅 $\{X_n, \mathscr{F}_n\}$ 在 n 步中上穿区间 $[a,b]$ 次数 V_a^b 的数学期望的杜布不等式.

定理 6 (杜布上穿不等式) 设 $\{X_n, \mathscr{F}_n, n = 0, 1, \cdots, M\}$ 是下鞅,如果从 X_0 起顺次到 X_M,自闭区间 $[a,b]$ 的左方到其右方共 V_a^b 次,则其期望

$$EV_a^b \leqslant \frac{1}{b-a}\{E(X_M - a)^+ - E(X_0 - a)^+\} \leqslant \frac{1}{b-a}[EX_M^+ + |a|].$$

5.3 鞅收敛定理

下面的杜布定理(**鞅收敛定理**)给出了鞅收敛的基本结果.

定理 7 设 $\{X_n, \mathscr{F}_n, n \geqslant 0\}$ 是下鞅且满足条件 $\sup\limits_{n \geqslant 0} E|X_n| < \infty$,则存在 $\mathscr{F}_\infty (= \sigma(\bigcup\limits_{k=0}^{\infty} \mathscr{F}_k))$ 可测的随机变量 X_∞,使 $E|X_\infty| < \infty$,且

$$P(\lim_{n \to \infty} X_n = X_\infty) = 1.$$

如果 $\{X_n, \mathscr{F}_n, n \geqslant 0\}$ 是鞅(或下鞅)且一致可积(即 $\lim\limits_{\lambda \to \infty} \int_{\{|X_n| \geqslant \lambda\}} |X_n| \mathrm{d}p = 0$,关于 $n \geqslant 0$ 一致成立),则存在 $\mathscr{F}_\infty$ 可测且可积的随机变量 X_∞,使

1° $X_n \to X_\infty$ (a.s., $n \to \infty$),

2° $E|X_n - X_\infty| \to 0$ ($n \to \infty$),

3° $\{X_n, \mathscr{F}_n, 0 \leqslant n \leqslant \infty\}$ 是鞅(相应地,为下鞅),即对于一切 $n \geqslant 0$,有

$$E(X_\infty | \mathscr{F}_n) = X_n \qquad (\text{或相应地}, X_\infty \geqslant X_n, \text{a.s.}).$$

由上述定理可得:若 Y 是任一可积随机变量,$\{\mathscr{F}_n, n \geqslant 0\}$ 为增 σ 域族,则 $X_n = E(Y | \mathscr{F}_n), n \geqslant 0$,是 $\{\mathscr{F}_n, n \geqslant 0\}$ 鞅,$\{X_n\}$ 一致可积,当 $n \to \infty$ 时

$$X_n \to E(Y | \mathscr{F}_\infty) \qquad (\text{a.s.}),$$

且

$$E|X_n - E(Y | \mathscr{F}_\infty)| \to 0.$$

5.4 局部鞅及下鞅分解定理

鞅的概念可自然推广为局部鞅的概念.

定义 2 对于随机过程$\{X_t, \mathscr{F}_t, t \in T\}$,存在一个有限停时序列$\{\tau_m, m \geqslant 1\}$,$\tau_m \uparrow$(以概率1),使得对于每一个$m \geqslant 1$,"停止"过程

$$X^{\tau_m} = \{X_{t \wedge \tau_m} I_{\tau_m > 0}, \mathscr{F}_t, t \in T\}$$

是鞅.在离散情形下,每一局部鞅都是一个鞅变换,即可以表示成$X_n = (V \cdot Y)_n$的形式.其中V是一个可料过程,Y是一个鞅,记号$(V \cdot Y)_n$的含义见上述例2.

定理 8(杜布-梅叶尔(Doob-Meyer)分解) 每一下鞅$\{X_t, \mathscr{F}_t, t \in T\}$具有唯一的分解

$$X_t = M_t + A_t,$$

其中$M = \{M_t, \mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$为一局部鞅,$A = \{A_t, \mathscr{F}_t, t \geqslant 0\}$是一可料非减增过程.定理8也称为**下鞅分解定理**.

特别地,若$m = \{m_t, \mathscr{F}_t, t \in T\}$是一平方可积鞅,则其平方

$$m^2 = \{m_t^2, \mathscr{F}_t, t \in T\}$$

是下鞅,在它的杜布-梅叶尔分解$m_t^2 = M_t + \langle m \rangle_t$之中,$\langle m \rangle = \{\langle m \rangle_t, \mathscr{F}_t, t \in T\}$,称之为鞅的二次特征.

6 无穷粒子马尔可夫过程

这一领域作为概率论的一个新分支,开始于20世纪60年代末,起源于统计物理,用于描述和分析平衡态统计物理中平衡测度的经典吉布斯(J.W.Gibbs)态的随机模型的时间演化系统.

相变问题是平衡态统计物理中一个很重要的问题.经典的处理方法是研究有限粒子系统的吉布斯态(平衡态)的某些函数(如序参数、比能等)当系统扩张成无穷粒子系统时的性质,从而得到有关相变的结论.由于相变问题本质上是无穷粒子系统的集体现象,20世纪60年代后期一些学者用现代概率理论直接定义无穷粒子系统的吉布斯态(即吉布斯随机场).20世纪70年代以来,又陆续提出一些类型的马尔可夫过程作为吉布斯态的动态模型,这就是**无穷粒子马尔可夫过程**.

6.1 几类模型

6.1.1 *伊辛模型*

记全体d维整点集为$\mathbf{Z}^d$,Λ是$\mathbf{Z}^d$的任一有限子集,$u \in \mathbf{Z}^d$表示铁磁原子所处的位置,$\xi(u) \in \{+1, -1\}$表示u处原子的自旋状态,组态空间为$X = \{-1, 1\}^{\mathbf{Z}^d}$.对于任何$u, v \in \mathbf{Z}^d$,$u \neq v$,$J(u, v)$表示$u, v$处的粒子相互作用的强度.令$X(\Lambda)$表示$\Lambda$上的组态集.考虑系统随时间演化的过程,记系统在时刻$t \in [0, \infty)$的组态为

$$\xi_t = \{\xi_t(u) : u \in \mathbf{Z}^d\}.$$

现欲求解对于任何 $\beta > 0$,是否有一马尔可夫过程使对于任何 $u,v \in \mathbf{Z}^d$, $u \neq v$,以及任何初始组态 $\xi = \{\xi(u): u \in \mathbf{Z}^d\}$,满足当 $t \to 0$ 时,有

$$P_\xi(\xi_t(u) \neq \xi(u)) = (\exp\{-\beta \sum_v J(u,v)\xi(u)\xi(v)\})t + o(t),$$

$$P_\xi(\xi_t(u) \neq \xi(u), \xi_t(v) \neq \xi(v)) = o(t).$$

这一过程与 β 有关.它的含意是在 $t = 0$ 的瞬间, $u \in \mathbf{Z}^d$ 处粒子状态改变的速率是 $\exp\{-\beta \sum_v J(u,v)\xi(u)\xi(v)\}$,两个粒子同时改变状态的速率是零.若

$$J(u,v) = \begin{cases} 1 & (|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}| = 1), \\ 0 & (|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}| \neq 1), \end{cases}$$

其中 $|\boldsymbol{u}|$, $\boldsymbol{u} \in \mathbf{Z}^d$,表示向量 $\boldsymbol{u}$ 的欧几里德长度,即 $|\boldsymbol{u}| = \left[\sum_{i=1}^d \boldsymbol{u}_i^2\right]^{1/2}$,则称该过程 $\{\xi_t, t \geqslant 0\}$ 为紧邻伊辛(Ising)过程.

可以证明 d 维紧邻伊辛过程总是存在的,并且当 $d = 1$ 时,对于任何 $\beta > 0$,它的不变测度(即平稳分布)是唯一的;当 $d \geqslant 2$ 时,存在 $\beta_c^{(d)} \in (0, \infty)$,使当 $\beta < \beta_c^{(d)}$ 时,不变测度是唯一的,当 $\beta > \beta_c^{(d)}$ 时,不变测度不是唯一的.用统计物理的术语来说就是:当 $d = 1$ 时紧邻伊辛模型没有相变;当 $d \geqslant 2$ 时有相变. $\beta_c^{(d)}$ 称为临界点.当 $d = 2$ 时,还算出了

$$\beta_c^{(d)} = \frac{1}{2}\operatorname{arcsinh}(1) \approx 0.44.$$

当 $d > \beta_c^{(2)}$ 时,它的任何不变测度都是两个给定的不变测度 μ^+, μ^- 的凸组合,即

$$\alpha\mu^+ + (1-\alpha)\mu^- \qquad (0 \leqslant \alpha \leqslant 1).$$

至于 $d \geqslant 3$ 的情形,所知甚少,这是对统计物理及无穷粒子马尔可夫过程都很重要的问题.

6.1.2 基本接触模型(或传染病模型)

设想粒子系统在每一整点 $u \in \mathbf{Z}^d$ 处有一个粒子,每个粒子有两个可能的状态 0 或 1,可分别理解为"健康"和"病态"两种状态.用 $\eta(u)$ 表示 u 处粒子的状态,则 $\eta = \{\eta(u): u \in \mathbf{Z}^d\}$ 表示整个粒子系统的组态.考虑系统随时间发展的演化过程.设 $\lambda > 0$ 为一任意给定的常数,系统在 $t = 0$ 时的组态为 η,它在 $t = 0$ 的瞬间, u 处粒子状态改变的速率为

$$c(u,\eta) = \begin{cases} 1 & (\eta(u) = 1), \\ \lambda \sum\limits_{v:|u-v|=1} \eta(v) & (\eta(u) = 0). \end{cases}$$

它可解释为: u 处的粒子如果原来处于病态,则转变成健康的速率为 1;如果原来是健康的,则被传染为病态的速率为 $\lambda \sum\limits_{v:|u-v|=1} \eta(v)$(即与它紧邻的病态粒子数成比例).

记 $\eta_t = \{\eta_t(u): u \in \mathbf{Z}^d\}$ 为满足上述要求的随时间演化的过程,用 P_η 表示始

于 η 的过程的概率测度，要求它对于任何 $u,v\in\mathbf{Z}^d$，$u\neq v$ 及任何初始组态 $\eta_0=\eta$，满足当 $t\to 0$ 时，

$$P_\eta(\eta_t(u)\neq\eta(u))=c(u,\eta)t+o(t),$$
$$P_\eta(\eta_t(u)\neq\eta(u),\eta_t(v)\neq\eta(v))=o(t).$$

这一模型称之为**基本接触模型**．相应的过程称为基本接触过程．

可以证明：对于任何 $\lambda>0$，基本接触过程总是存在的，而且存在 $\lambda_c^{(d)}$，当 $\lambda<\lambda_c^{(d)}$ 时，无论从什么组态出发，当 $t\to\infty$ 时，系统的概率分布"最后"集中在组态 $\{\theta_u:u\in\mathbf{Z}^d\}$，$\theta_u\equiv 0$．即不变测度是唯一的；而当 $\lambda>\lambda_c^{(d)}$ 时，不变测度不是唯一的，而且

$$(2d-1)^{-1}\leqslant\lambda_c^{(d)}\leqslant\frac{2}{d}.$$

6.1.3　选举模型

设组态空间 $X=\{0,1\}^{\mathbf{Z}^d}$，速率函数为

$$c(u,\eta)=\sum_{u\in\mathbf{Z}^d}p(u,v)I_{\{\xi:\xi(v)\neq\eta(v)\}}(\eta)\qquad(u\in\mathbf{Z}^d,\eta\in X),$$

其中 I_A 是集 A 的示性函数；

$$p(u,v)\geqslant 0\qquad(u,v\in\mathbf{Z}^d),$$
$$\sum_v p(u,v)=1\qquad(u\in\mathbf{Z}^d).$$

这一模型称为**选举模型**，相应的过程称为选举过程．它的直观解释为：设"0"，"1"表示两种不同的观点，在 u 处人的观点的改变受 v 处具不同观点的人影响，改变的速率为 $p(u,v)$．这种影响是独立的．因此 u 处的人观点改变的总速率为 $c(u,\eta)$．

选举过程有两个平凡的不变测度，即集中在 $\eta=0$ 和 $\eta=1$ 处的点测度．问题是：是否存在其他的极不变测度(所谓极不变测度是不变测度集的极点，它不能表为其他不变测度的凸组合)？回答是：若

$$p(u,v)=\frac{1}{2d}\qquad(当\ |\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}|=1),$$

则

$$p(u,v)=0\qquad(当\ |\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}|\neq 1).$$

当 $d\leqslant 2$ 时，没有其他的极不变测度；

当 $d\geqslant 3$ 时，存在其他的极不变测度．极不变测度集为单参数族：$\{\mu_\rho:0\leqslant\rho\leqslant 1\}$．

$$\mu_\rho(\eta:\eta(u)=1)=\rho\qquad(\forall\,u\in\mathbf{Z}^d).$$

6.1.4　排它过程

设 S 是可数集，组态空间 $X=\{0,1\}^S$．如果 $\eta\in X$，$\{u:\eta(u)=1\}$ 表示被质点占据的位置集，质点在 S 上按下述规则运动(设 $p(u,v)\geqslant 0,\sum_v p(u,v)=1$)．

1° 在 u 处的质点等待一个参数为 1 的指数时间；

2° 在这一时间结束时它以概率 $p(u,v)$ 选择一个位置 $v \in S$；

3° 如果在 v 处 $\eta(v)=1$(即有质点占据)，则它仍呆在 u 处，如果 $\eta(v)=0$(v 处无粒子)，则它移动至 v.

用 $\{\eta_t, t \geqslant 0\}$ 表示**排它过程**，则

$$P(\eta_{t+s}(u)=0, \eta_{t+s}(v)=1 \mid \eta_t)=p(u,v)s+o(s)$$
$$(\text{当 } s \to 0, \text{且 } \eta_t(u)=1, \eta_t(v)=0, u \neq v).$$

如果 $p(u,v)$ 是对称随机矩阵，即

$$p(u,v)=p(v,u), \quad p(u,v) \geqslant 0, \quad \sum_v p(u,v)=1,$$

则存在不变测度的单参数族——具有常值密度 $\rho \in [0,1]$($\mu_\rho(\eta:\eta(u)=1)=\rho$，对于一切 $u \in S$) 的伯努利乘积测度. 在这种情况下，没有其他不变测度的充分必要条件是：如果

$$\sum_v p(u,v)f(v)=f(u),$$

且

$$|f| \leqslant C,$$

则 f 是 S 上的常值函数.

6.2　无穷粒子马尔可夫过程的构造

在适当条件下，无穷粒子马尔可夫过程的构造分如下三个步骤进行：

(1) 把给定的无穷小速率写作一个算子，它的闭包用来作为马尔可夫过程的母元；

(2) 利用希尔-若司达(Hille-Yosida)定理构造相应的半群；

(3) 由马尔可夫过程一般理论，导出这一半群相应过程所要求的构造性质.

希尔-若司达定理适用于一般巴拿赫空间. 这里可把它特殊化到一个特殊的巴拿赫空间——紧距离空间 X 上的连续函数空间 $C(X)$ 上，即 $f \in C(X)$，其范数 $\|f\|=\max_{x \in X}|f(x)|$.

定理 1　Ω 为 $C(X)$ 的线性算子，为要存在一个随机连续费勒函数 $p(t,x,A)$，$t \geqslant 0, x \in X, A \in \mathscr{B}(X)$，使得由

$$S(t)f=\int_X p(t,\cdot,\mathrm{d}y)f(y) \qquad (f \in C(X), t \geqslant 0)$$

定义的连续压缩半群的无穷小母元为 Ω 的充分必要条件是：

1° Ω 的定义域 $\mathscr{D}(\Omega)$ 在 $C(X)$ 中稠；

2° 对于一切 $\lambda>0$，$\mathscr{R}(I-\lambda\Omega)=C(X)$；

3° 对于一切 $f \in \mathscr{D}(\Omega)$，$\lambda \geqslant 0$，

$$\min\{f(x):x \in X\} \geqslant \min\{f(x)-\lambda\Omega f(x):x \in X\};$$

4° 恒取 1 为值的常值函数 $1 \in \mathscr{D}(\Omega)$，且 $\Omega 1=0$. 在此条件下，费勒函数是唯一

决定的，Ω 与其生成的半群之间有下列关系：

(1) 对于一切 $f \in C(x)$，$S(t)f = \lim_{n\to\infty}(I - \frac{t}{n}\Omega)^{-n}f$；

(2) 对于一切 $f \in \mathscr{D}(\Omega)$，$\Omega f = \lim_{t\to 0}[S(t)f - f]/t$；

(3) 对于一切 $f \in \mathscr{D}(\Omega)$，$\frac{\mathrm{d}[S(t)f]}{\mathrm{d}t} = \Omega S(t)f = S(t)\Omega f$.

一般地，在实际问题中尚不能给出无穷小母元，而是给出一个线性算子，它的闭包才是马尔可夫半群的无穷小母元. 算子的闭包的定义如下.

定义 1　设 T 为巴拿赫空间 W 中的一个算子，$\mathscr{D}(\mathrm{T})$ 是它的定义域，则

$$G(\mathrm{T}) = \{(f,\mathrm{T}f): f \in \mathscr{D}(\mathrm{T})\}$$

称为 T 的图. 在 $W \times W$ 上，定义其运算及范数如下：

$$(f_1, g_1) + (f_2, g_2) = (f_1 + g_1, f_2 + g_2),$$

$$\alpha(f,g) = (\alpha f, \alpha g) \qquad (\alpha \in (-\infty, \infty)),$$

$$\|(f,g)\| = \|f\| + \|g\| \qquad (f_i, g_i, f, g \in w).$$

若 $G(\mathrm{T})$ 是 $W \times W$ 中的闭集，则称 T 为闭算子. 若 S，T 均为 W 上的线性算子，且 $G(\mathrm{S}) \subset G(\mathrm{T})$（即 $\mathscr{D}(\mathrm{S}) \subset \mathscr{D}(\mathrm{T})$，且对于一切 $f \in \mathscr{D}(\mathrm{S})$，有 $\mathrm{S}f = \mathrm{T}f$），则称 T 是 S 的扩张，S 为 T 在 $\mathscr{D}(\mathrm{S})$ 上的限制. 记 T 在 D 上的限制为 T_D. 若 T 有一闭算子为其扩张，则称 T 为可闭的，若有一算子 $\overline{\mathrm{T}}$ 使

$$G(\overline{\mathrm{T}}) = \overline{G(\mathrm{T})} \qquad (G(\mathrm{T}) \text{ 在 } W \times W \text{ 中的闭包}),$$

则称 $\overline{T}$ 为 T 的闭包.

一般地，给出的速率函数可以写作一个算子，它的闭包正是一个马尔可夫过程的母元.

为了简单起见，下面以自旋变相过程为例说明过程的构造. 自旋变相过程包括了伊辛模型（只要将 $\{-1, +1\}$ 做一变换变成 $\{0,1\}$ 即可），接触模型及选举模型.

设 $X = \{0,1\}^S$，S 为可数集，$S = \{u_1, u_2, \cdots\}$，$\eta \in X$，定义范数

$$\|\eta\| = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\eta(u_n)}{2^n},$$

于是 X 上赋予距离 $d(\eta,\xi) = \|\eta - \xi\|$，$\eta, \xi \in X$，成为紧距离空间. 用 $C(X) = \{f: f \text{是} X \text{上的连续函数}\}$ 表示 X 上连续函数空间，用 $D[0,\infty) = \{\{\eta_t, 0 \leqslant t < \infty\}: \eta_t \in X \text{ 且 } \eta.\text{ 是右连续左极限存在的}[0,\infty)\text{上的函数}\}$ 作为过程的轨道空间. 再设 $\mathscr{F}$ 是使对于一切 $s \in [0,\infty)$，$D[0,\infty)$ 到 X 上的映射 $\pi_s: \pi_s(\eta.) = \eta_s$ 是可测的 σ 域. 于是 $(D[0,\infty), \mathscr{F})$ 是一可测空间. 令

$$_u\eta(v) = 1 - \eta(u) \qquad (\text{如果 } u = v),$$

$$_u\eta(v) = \eta(v) \qquad (\text{如果 } v \neq u),$$

$$\Delta_f(u) = \sup_{\eta} |f(_u\eta) - f(\eta)|.$$

对于光滑的函数类，

$$D(\Omega) = D(X) = \left\{f \in C(X): \|f\| = \sum_u \Delta_f(u) < \infty\right\}.$$

定义

$$\Omega f(\eta) = \sum_{u \in S} c(u,\eta)[f({}_u\eta) - f(\eta)],$$

其中 $c(u,\eta)$ 是自旋变相过程的速率函数,它表征 u 处的粒子由 $\eta(u)$ 变成 $1 - \eta(u)$ 的速率.假定下述条件成立:

1° 对于一切 $u \in S$, $c(u,\eta)$ 是 X 上的连续函数,

2° $\sup_u \sup_\eta c(u,\eta) < \infty$,

3° $\sup_u \sum_{v \neq u} \sup_\eta |c(u,{}_v\eta) - c(u,\eta)| < \infty$,

则算子 Ω 的闭包 $\overline{\Omega}$ 是一马尔可夫半群 $\{S(t), t \geqslant 0\}$ 的母元,且算子 $I - \lambda\Omega$ 的值域的闭包为 $C(X)$.

使用一般马尔可夫过程的理论,可得到在 $\{D[0,\infty), \mathscr{F}\}$ 上的一族概率测度集 $\{P^\eta : \eta \in X\}$ 具有下述性质:

1° $P^\eta(\{\zeta_t, t \geqslant 0\} \in D[0,\infty), \zeta_0 = \eta) = 1 \qquad (\forall \eta \in X)$;

2° $\{\eta : P^\eta(A)\} \in \mathscr{B}(X) \qquad (\forall A \in \mathscr{F})$,

其中 $\mathscr{B}(X)$ 是 X 上的博雷尔域;

3° $P^\eta(\{\eta_{s+t}, t \geqslant 0\} \in A \mid \mathscr{F}_s) = P^{\eta_s}(A) \qquad (\text{a.s.}(P^\eta))$;

4° $S(t)f(\eta) = E^\eta f(\eta_t) = \int_{D[0,\infty)} f(\eta_t)\,\mathrm{d}P^\eta \qquad (\forall f \in C(X), \eta \in X)$.

这就完成了过程的构造.

设 μ 是 $(X, \mathscr{B}(X))$ 上的概率测度,定义 $\mu_t = \mu S(t)$ 为

$$\int f \mathrm{d}\mu_t = \int S(t) f \mathrm{d}\mu \qquad (\forall f \in C(X)),$$

如果 $\mu S(t) = \mu$ 对于一切 $t \geqslant 0$ 成立,则称 μ 为不变测度.或者等价地,如果 $\int \Omega f \mathrm{d}\mu = 0$,对于一切 $f \in D(\Omega)$ 成立,则称 μ 为不变测度.因为空间 X 是紧的,因而 $\{\mu_t, t \geqslant 0\}$ 是胎紧的,即必定存在弱收敛意义下的极限,亦即存在 ν 及 $\{t_n\}$ 使 $\mu_{t_n} \Rightarrow \nu$.

一般地,过程构造的主要问题是:

(1) 过程的存在性和唯一性(即马尔可夫半群的存在与唯一性).

(2) 遍历或有相变.当不变测度唯一时,称过程遍历,不唯一时有相变(往往与某些参数有关).

(3) 吸引场.即如果不变测度不唯一,对于不变测度 ν,什么样的初始分布 μ 有 $\mu S(t) \Rightarrow \nu$.

(4) 收敛速度问题(例如是指数速度收敛或多项式速度收敛).

6.3 一些基本技巧

6.3.1 耦合方法

耦合是在无穷粒子系统的研究中最重要和最常用的技巧.简单地说,耦合就是

把两个或多个随机过程构造在同一概率空间中.

为了解释耦合方法的作用,下面举两个简单的例子来说明.

例1 假定η是实随机变量,f,g是$\mathbf{R}$上两个有界增函数.试证明$f(\eta)$和$g(\eta)$正相关(即协方差$\operatorname{cov}(g(\eta),f(\eta))\geqslant 0$).

证 所要讨论的问题只涉及一个随机变量η及其函数$f(\eta),g(\eta)$.现假定构造另一个与η同分布的随机变量ξ,且使二者独立,这样就将二者耦合到同一个概率空间(乘积空间)上了.于是由于f和g皆为增函数,故有

$$\begin{aligned}0&\leqslant E(f(\eta)-f(\xi))(g(\eta)-g(\xi))\\&=Ef(\eta)g(\eta)+Ef(\xi)g(\xi)-Ef(\xi)g(\eta)-Ef(\eta)g(\xi)\\&=Ef(\eta)g(\eta)+Ef(\xi)g(\xi)-Ef(\xi)Eg(\eta)-Ef(\eta)Eg(\xi)\\&=2(Ef(\eta)g(\eta)-Ef(\eta)Eg(\eta))\\&=2\operatorname{cov}(f(\eta),g(\eta)).\end{aligned}$$

例2 设$\{p(x,y),x,y\in S\}$是有限集S上离散时间马尔可夫链的转移概率,设$p^{(k)}(x,y)$是相应的k步转移概率.假定存在$m\geqslant 1$,使

$$\min_{x,y\in S}p^{(m)}(x,y)=\epsilon>0,$$

则存在$\{\pi(y):y\in S\}$,使得

$$\lim_{k\to\infty}p^{(k)}(x,y)=\pi(y)\qquad(\forall x,y\in S),$$

且

$$\sum_x\pi(x)p(x,y)=\pi(y).$$

证 设$\{(X_n,Y_n),n\in\mathbf{N}\}$是$S\times S$上的马尔可夫链,它以下述方式演化:

(1) X_n,Y_n以转移概率$\{p(x,y):x,y\in S\}$独立地运动,直至$X_n=Y_n$;

(2) 从$X_n=Y_n$时刻起两个链按照同一转移概率沿同一轨道运动.等价地,可用转移概率来描述,即

$$p((x,y),(u,v))=\begin{cases}p(x,u)p(y,v) & (x\neq y),\\ p(x,u) & (x=y\text{ 且 }u=v),\\ 0 & (x=y\text{ 且 }u\neq v).\end{cases}$$

这一耦合马尔可夫链具有如下性质:

1° $\{X_n\},\{Y_n\}$都是以给定的$\{p(x,y),x,y\in S\}$为转移概率的马尔可夫链;

2° $\lim\limits_{n\to\infty}P^{(x,y)}(X_n=Y_n)=1\qquad(\forall(x,y)\in S\times S)$,

其中$P^{(x,y)}$表示初始概率集中在点(x,y)处的马尔可夫链的概率测度.

性质1°可以通过$p((x,y),(u,v))$对v求和得到.下面证明性质2°.

设τ表示耦合过程两个坐标相同的最初时刻,则对于一切$(x,y)\in S\times S$,

$$\begin{aligned}P^{(x,y)}(\tau\leqslant m)&\geqslant\sum_{z\in S}p^{(m)}(x,z)p^{(m)}(y,z)\\&\geqslant\epsilon\sum_{z\in S}p^{(m)}(y,z)=\epsilon.\end{aligned}$$

由马尔可夫链的性质,有

$$P^{(x,y)}(\tau\leqslant km)\geqslant 1-(1-\epsilon)^k.$$

因此，

$$P^{(x,y)}(X_n \neq Y_n) \leqslant P^{(x,y)}(\tau > n) \leqslant (1-\varepsilon)^{[n/m]}.$$

当 $n \to \infty$ 时上式指数地趋于 0. 根据耦合的性质 1°,

$$|p^{(k)}(u,y) - p^{(k)}(v,y)| = |P^{(u,v)}(X_k = y) - P^{(u,v)}(Y_k = y)|$$

$$= |P^{(u,v)}(X_k = y, Y_k \neq y) - P^{(u,v)}(X_k \neq y, Y_k = y)| = P^{(u,v)}(X_k \neq Y_k).$$

回到原来的证明. 由性质 2° 知, $P^{(x,y)}$ 趋向于 0. 由于随 k 的增加, $\max\limits_x p^{(k)}(x,y)$ 减小, 而 $\min\limits_x p^{(k)}(x,y)$ 增加, 因而 $\lim\limits_{k\to\infty} p^{(k)}(x,y)$ 存在, 且与 x 无关, 记作 $\pi(y)$. 再用 S 的有限性易证 $\pi(y) = \sum\limits_{z\in S}\pi(z)p(z,y)$.

6.3.2 单调性

在紧距离空间 X 上定义一个偏序($\eta \leqslant \xi$, 如对于一切 u, $\eta(u) \leqslant \xi(u)$), 使得

$$\{(\eta,\xi) \in X \times X : \eta \leqslant \xi\}$$

是 $X \times X$ 的一个闭集. 令

$$\mathscr{M} = \{f \in C(X) : f(\eta) \leqslant f(\xi), \text{如果 } \eta \leqslant \xi\},$$

则 $\mathscr{M}$ 为单调函数类.

测度的偏序关系有如下定义定理.

定义 2 设 μ_1, μ_2 是$(X, \mathscr{B}(X))$上的概率测度, 如果

$$\int f \mathrm{d}\mu_1 \leqslant \int f \mathrm{d}\mu_2 \qquad (\forall f \in \mathscr{M}),$$

则称

$$\mu_1 \leqslant \mu_2.$$

定理 2 设 $\mu_1 \leqslant \mu_2$, 则当且仅当在$(X \times X, \mathscr{B}(X \times X))$上存在概率测度 ν, 使得

$$\nu((\eta,\xi) : \eta \in A) = \mu_1(A) \qquad (\forall A \in \mathscr{B}(X)),$$

$$\nu((\eta,\xi) : \xi \in A) = \mu_2(A) \qquad (\forall A \in \mathscr{B}(X)),$$

且

$$\nu((\eta,\xi) : \eta \leqslant \xi) = 1.$$

使用单调性可以找到吸引过程的弱极限. 关于吸引过程, 有如下定义和定理.

定义 3 称具有速率函数 $c(u,\eta)$ 的自旋变相系统是吸引的, 如果对于一切 $\eta \leqslant \xi$,

$$c(u,\eta) \leqslant c(u,\xi) \qquad (\text{如果 } \eta(u) = \xi(u) = 0),$$

$$c(u,\eta) \geqslant c(u,\xi) \qquad (\text{如果 } \eta(u) = \xi(u) = 1).$$

定理 3 设 $\{S(t), t \geqslant 0\}$ 是吸引自旋系统的半群, δ_0 和 δ_1 分别表示集中在 $0 = \{\eta(u) = 0; \forall u \in S\}$ 和 $1 = \{\eta(u) = 1; \forall u \in S\}$ 处的点测度, 则

1° $\delta_0 S(s) \leqslant \delta_0 S(t)$ (如果 $s \leqslant t$);

2° $\delta_1 S(s) \geqslant \delta_1 S(t)$ (如果 $s \leqslant t$);

3° $\delta_0 S(t) \leqslant \mu S(t) \leqslant \delta_1 S(t)$ ($\forall t \geqslant 0$ 及 X 上的概率测度 μ);

4° $\underline{\nu} = \lim\limits_{t\to\infty}\delta_0 S(t)$ 和 $\overline{\nu} = \lim\limits_{t\to\infty}\delta_1 S(t)$ 存在；

5° 如果 $\nu = \lim\limits_{n\to\infty}\mu S(t_n)$，则 $\underline{\nu} \leqslant \nu \leqslant \overline{\nu}$；

6° $\underline{\nu}, \overline{\nu}$ 都是平移不变的遍历测度，

$$\theta_x\eta:\theta_x\eta(u) = \eta(u-x) \qquad (\forall x,u\in S,\eta\in X),$$

$$\theta_x f(\eta) = f(\theta_x\eta) \qquad (f\text{ 为 }X\text{ 上的函数}),$$

则有

$$\int\theta_x f\mathrm{d}\mu = \int f\mathrm{d}\mu \qquad (\forall f\in\mathscr{M}, x\in X).$$

一个概率测度 μ 称为遍历是指：如果

$$\theta_x f = f \quad (\text{a.s.}-\mu),$$

其中 f 是可测的，则存在一常数 C，使得 $\mu(f = C) = 1$.

速率函数满足平移不变性及吸引性的自旋系统都可以通过单调性定理3来讨论其不变测度是否是唯一的（如 $\underline{\nu} = \overline{\nu}$，则唯一；否则不唯一）.

6.3.3　对偶性

对偶性在研究无穷粒子系统时是一个有用的技巧. 两个过程用一种对偶关系相连接，原始过程可以很复杂，难于处理，但对偶过程则可以较简单，甚至可以是可数状态马尔可夫链.

定义4　设 $\{\eta_t, t\geqslant 0\}$ 和 $\{\xi_t, t\geqslant 0\}$ 分别是具有状态空间 X 和 Y 的马尔可夫过程，$H(\eta,\xi)$ 是定义在 $X\times Y$ 上的有界可测函数，则称过程 $\{\eta_t, t\geqslant 0\}$ 与 $\{\xi_t, t\geqslant 0\}$ 相对于 H 是彼此对偶的，如果

$$E^{\eta}H(\eta_t,\xi) = E^{\xi}H(\eta,\xi_t)$$

对于一切 $\eta\in X$ 和 $\xi\in Y$ 都成立.

对于自旋变相过程，常选择如下的对偶空间和对偶函数：

设 $X = \{0,1\}^S$，S 可数，

$$\mathscr{S} = \{A\subset S\cap\{\infty\}: |A| < \infty\},$$

其中 ∞ 为任一不属于 S 的元，因而对偶过程是 $\mathscr{S}$ 上的马尔可夫链.

$$H_1(\eta,A) = \begin{cases}\theta_{A\cap S}(\eta) & (A\not\ni\infty),\\ -\theta_{A\cap S}(\eta) & (A\ni\infty),\end{cases}\quad (A\in\mathscr{S},\eta\in X),$$

其中

$$\theta_A(\eta) = \prod_{u\in A}(1-\eta(u)) \qquad (A\subset S, |A| < \infty, \eta\in X).$$

$$H_2(\eta,A) = \begin{cases}\chi_{A\cap S}(\eta) & (A\not\ni\infty),\\ -\chi_{A\cap S}(\eta) & (A\ni\infty),\end{cases}\quad (\eta\in X, A\in\mathscr{S}),$$

其中

$$\chi_A(\eta) = \prod_{u\in A}(2\eta(u)-1) \qquad (A\subset S, |A| < \infty, \eta\in X).$$

在上述各式中，当 A 为空集时，其乘积理解为1.

对于 H_1,定义速率函数

$$c_1(u,\eta) = c(u)[(1-\eta(u)) + (2\eta(u)-1)\sum_{A\in\mathscr{P}} p(u,A)H_1(\eta,A)].$$

对于 H_2,定义速率函数

$$c_2(u,\eta) = \frac{c(u)}{2}[1-(2\eta(u)-1)\sum_{A\in\mathscr{P}} p(u,A)H_2(\eta,A)],$$

其中

$$c(u)\geqslant 0,\quad \sup_u c(u) < \infty;$$

$$p(u,A)\geqslant 0,\quad b(u) = \sum_{A\in\mathscr{P}} p(u,A)\leqslant 1;$$

$$\sup_u c(u)\sum_{A\in\mathscr{P}} p(u,A)\,|A| < \infty.$$

可以证明,由上述定义的以 $c_i(u,\eta)$ 为速率函数的自旋过程 $\{\eta_u, t\geqslant 0\}$, $i=1,2$,存在,且对 $c_1(u,\eta)$ 来说,如果 $p(u,A)=0,\forall A\ni\infty$,则相应模型还是吸引的.

若定义

$$\lambda_1(A,B) = \sum_{u\in A\cap S} c(u)\sum_F{}' p(u,F)\qquad (B,A\in\mathscr{P}),$$

其中 $\sum_F{}'$ 中的 F 满足下列要求:

若 $\infty\in A\cap F$,则 $(A\setminus u)\cup F = B$;

若 $\infty\in A\cap F$,则 $((A\setminus u)\cup F)\setminus\infty = B$;

$$\lambda_2(A,B) = \sum_{u\in A\cap S} c(u)\sum_{F:F\Delta(A\setminus u)=B} p(u,F)\qquad (B,A\in\mathscr{P}),$$

其中 $F\Delta(A\setminus u)$ 是 F 与 $A\setminus u$ 的对称差.再令

$$q_i(A,B) = \begin{cases}\lambda_i(A,B) & (B\neq A),\\ -\sum_{\tilde{B}\neq A}\lambda_i(A,\tilde{B}) = -q_i(A) & (B=A),\end{cases}$$

$$(A,B\in\mathscr{P}, i=1,2),$$

则与 $\{\eta_u, t\geqslant 0\}$ 相对于 $H_i(\eta,A)$ 的对偶的过程为以 $q_i(A,B)$, $A,B\in\mathscr{P}$ 为 $\boldsymbol{Q}$ 矩阵的马尔可夫链.

选举模型与接触模型的 $c(u,\eta)$ 均可写成 $c_1(u,\eta)$ 的形式,选举模型的 $c(u,\eta)$ 还可写成 $c_2(u,\eta)$ 的形式.

利用对偶方法可以研究过程的遍历性及吸引场等问题.

6.4　非紧空间无穷粒子系统

下面以反应扩散过程为例来说明非紧空间无穷粒子系统的性质.

设 S 是可数集,$u\in S$ 表示位置.在每个位置 u,可以有任意有限个粒子,于是粒子数的集合为 $\mathbf{Z}_+$,在空间 $E=\mathbf{Z}_+^S$ 上,用转移概率 $p=\{p(u,v):u,v\in S\}$ 及强

度函数 $C_u(k), k \in \mathbf{Z}_+, u \in S$，来描述当 u 处有 k 个粒子时其中之一移动到 v 处的速率 $c_u(k)p(u,v)$（称为扩散速率）；而在 u 处粒子数由 i 个变到 j 个的速率为 $q(i,j)$（$i \neq j$，称为反应速率），$i, j \in \mathbf{Z}_+$，

$$q(i,i) = -\sum_{j \neq i} q(i,j).$$

$$\boldsymbol{Q} = [q(i,j)] \qquad (i, j \in \mathbf{Z}_+),$$

为 $\boldsymbol{Q}$ 矩阵.

若 $\{\alpha_u : u \in S\}$ 是可和的正数序列，且存在 $M < \infty$，使得

$$\sum_v p(u,v)\alpha_v \leqslant M\alpha_u \qquad (\forall\, u \in S).$$

又设

$$c_u \geqslant 0, \quad C_u(0) = 0.$$

令

$$E_0 = \{x \in E : \| x \| = \sum_{u \in S} x_u \alpha_u < \infty\},$$

则可以定义反应扩散过程的形式母元为

$$\Omega f(x) = \sum_{u \in S} \sum_{k \neq 0} q(x_u, x_u + k)(f(x + ke_u) - f(x)) + \sum_{u \in S} c_u(x_u) \sum_{v \in S} p(u,v)(f(x - e_u + e_v) - f(x)) \qquad (x \in E_0).$$

令

$$g(j_1, j_2) = \sum_{k \neq 0} (q(j_2, j_2 + k) - q(j_1, j_1 + k)) k (j_2 - j_1)^{-1},$$

$$h(j_1, j_2) = 2\sum_{k=1}^{\infty} ((q(j_2, j_1 - k) - q(j_1, 2j_1 - j_2 - k))^+ + (q(j_1, j_2 + k) - q(j_2, 2j_2 - j_1 + k))^+) k (j_2 - j_1)^{-1},$$

$$j_2 > j_1 \geqslant 0,$$

其中 $(a-b)^+$ 表示 $(a-b)$ 的正部. 即若 $a > b$，则 $(a-b)^+$ 为 $a-b$，若 $a \leqslant b$，则 $(a-b)^+$ 为 0.

再令

$\mathscr{L} = \{f$: 存在 $L(f) < \infty$，使 $|f(x) - f(y)| \leqslant L(f) \| x - y \|$，$\forall\, x, y \in E_0$ 成立$\}$

$\mathscr{L}$ 称为 E_0 上的利普希茨(R. Lipschitz)函数类.

如果下述条件成立，即

1° $K = \sup_{u,k} | C_u(k) - C_u(k+1) | < \infty$，

2° $\| \beta \| = \sum_u \beta_u \alpha_u = \sum_u \left(\sum_{k=1}^{\infty} q(0,k)k \right) \alpha_u < \infty$，

3° $\sum_{k \neq 0} q(i, i+k) | k | < \infty \qquad (i \in \mathbf{Z}_+$，自然假设 $q(i,j) = 0$，若 $j \notin \mathbf{Z}_+)$，

4° $K_2' = \sup\{g(j_1, j_2) + h(j_1, j_2) : j_2 > j_1 \geqslant 0\} < \infty$，

则利用耦合方法可以证明下述定理.

定理4 在上述假设下,存在$\mathscr{L}$上的算子半群$S(t)$,使得$S(0)=I$,$S(t)$在$\mathscr{L}$的一致闭包$\overline{\mathscr{L}}$上强压缩($\|S(t)f\| \leqslant \|f\|$),且对于一切$f\in\mathscr{L}$,半群$S(t)$具有如下性质:

1° $$|S(t)f(x)-S(t)f(y)| \leqslant L(f)\|x-y\|\exp[t(K_2+K(M+1))] \qquad (x,y\in E_0),$$

其中

$$K_2 = K_2' + \sup\{(c_u(j_1)-c_u(j_2))(j_2-j_1)^{-1}: j_2>j_1\geqslant 0\};$$

2° $$\lim_{t\to 0}\frac{S(t)f(x)-f(x)}{t} = \Omega f(x) \qquad (x\in\mathscr{S}),$$

其中

$$\mathscr{S} = \{x\in E_0: |||x||| = \sum_{u\in S,x_u\neq 0}\sum_{k\neq 0} q(x_u,x_u+k)|k|\alpha_u < \infty\};$$

3° 存在E_0上的马尔可夫过程$(\{X_t\}_{t\geqslant 0},P^x)$,使得

$$S(t)f(x) = E^x f(X_t) = \int f(\xi)P^x[X_t\in \mathrm{d}\xi] \qquad (f\in\mathscr{L},x\in E_0).$$

7 超 过 程

超过程是近年来概率论研究中的最新课题之一.群体发展的数学模型之一是(古典)分支过程,而超过程则是一种取测度为值的具有分支性的马尔可夫过程.

7.1 古典分支过程

7.1.1 离散时间分支过程

设时间参数为$n=0,1,2,\cdots$,任何一代的一个粒子分裂为k个的概率为p_k,$k=0,1,2,\cdots$,其母函数记为

$$g(s) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k s^k \qquad (|s|\leqslant 1).$$

假设各个粒子的分裂是独立的,并设$Z_0=1$,用Z_n表示第n代的粒子数,则$\{Z_n:n\geqslant 0\}$称为离散时间分支过程,又称高尔顿-沃森(Galton-Watson)过程.

若第n代的粒子数为i,则由母函数可以求出第$n+1$代的粒子数$Z_{n+1}=j$的转移概率

$$P(Z_{n+1}=j\mid Z_n=i) = [g(s)]^i$$

中s^j的系数.以$g_n(s)$表示Z_n的母函数,即

$$g_n(s) = \sum_{k=0}^{\infty} P(Z_n=k)s^k \qquad (|s|\leqslant 1),$$

由于$Z_0\equiv 1$,故

$$g_0(s) = s, g_1(s) = g(s), \cdots, g_{n+1}(s) = g(g_n(s)), \cdots$$

从而可求出 $P(Z_n = i)$ 为 $g_n(s)$ 中 s^i 的系数,即有

$$EZ_1 = g'(1) = m;$$

$$EZ_n = m^n.$$

关于 Z_n 的极限性质,有

$$\lim_{n\to\infty} EZ_n = \lim_{m\to\infty} m^n = \begin{cases} 0 & (m < 1), \\ 1 & (m = 1), \\ \infty & (m > 1). \end{cases}$$

设 $0 < p_0 < p_0 + p_1 < 1$,以 q 表示**灭绝概率**,即

$$q = P(\lim_{n\to\infty} Z_n = 0).$$

可以证明,q 是 $g(s) = s$ 的在 $s \in [0,1]$ 中的最小根,且

$$q = 1 \qquad (若\ m \leqslant 1),$$

$$q < 1 \qquad (若\ m > 1),$$

$$P(\lim_{n\to\infty} Z_n = \infty) = 1 - q > 0 \qquad (若\ m > 1).$$

7.1.2 连续时间分支过程

称一个连续时间整值马尔可夫过程为连续时间分支过程,如果它的转移概率满足

$$\sum_{j=0}^{\infty} P_t(i,j)s^j = \left(\sum_{j=0}^{\infty} P_t(1,j)s^j\right)^i \qquad (t \geqslant 0, |s| \leqslant 1, i = 0,1,2,\cdots).$$

由上式可知,存在

$$a > 0, \quad p_i \geqslant 0, \quad \sum_{i=0}^{\infty} p_i = 1,$$

使得当 $t \to 0$ 时,

$$P_{ij}(t) = iap_{j-i+1}t + o(t) \qquad (j \geqslant i-1, j \neq i),$$

$$P_{ii}(t) = 1 - iat + ap_1 t + o(t),$$

$$P_{ij}(t) = o(t) \qquad (j < i-1).$$

即转移概率可以用序列 $\{a, p_k, k = 0,1,2,\cdots\}$ 表征,其概率可以解释为一个活着的粒子,在等待一个参数为 a 的指数时间死亡,当它死亡时留下 k 个后代的概率为 $p_k(k \geqslant 0)$. 所有粒子的作用彼此独立,且与过程的历史独立. 连续时间分支过程的极限性态与离散时间分支过程的极限性态有密切关系,它决定于单个粒子产生的后代的分布(即 $\{p_k, k \geqslant 0\}$). 如设连续时间分支过程 $Z(t)$ 满足 $Z(0) = 1$,则其在 t 时刻的期望为

$$EZ(t) = \exp\left(at\left(\sum_{j=1}^{\infty} jp_j - 1\right)\right) \qquad (t \geqslant 0),$$

易见

$$EZ(t) \to 0 \qquad (如果 \sum_{j=1}^{\infty} jp_j - 1 \leqslant 0).$$

$$EZ(t) \to \infty \qquad (\text{如果} \sum_{j=1}^{\infty} jp_j - 1 > 0).$$

前者称为下临界("="号成立时为临界)情形,后者称为上临界情形.在下临界和临界情况下,分支过程的灭绝概率为1;在上临界情况下,灭绝概率小于1.

如果 $EZ(t)\ln Z(t) < \infty$,则在下临界情况下,过程存活概率 $P(Z(t) > 0)$,当 $t \to \infty$ 时的渐近性态与 $KEZ(t)$ 的近似.其中 K 为一正常数.在具有有限的 $EZ^2(t)$ 的临界分支过程中,当 $t \to \infty$ 时,其渐近性态为

$$P(Z(t) > 0) \approx \frac{2}{\mathrm{var}Z(t)},$$

其中 $\mathrm{var}Z(t)$ 为 $Z(t)$ 的方差.

分支过程还有许多有趣的性质.

7.2 超过程的定义

设 $\mathbf{R}^d$ 为 d 维欧几里得空间,$\mathscr{B}^d$ 为其博雷尔 σ 代数,简记为$(\mathbf{R},\mathscr{B})$.以 M 表示 $\mathscr{B}$ 上所有有限测度的集,在 M 中引进子 σ 代数 $\mathscr{B}^M$,它是含 M 中一切下述集的最小 σ 代数:

$$\{\mu : \mu \in M, \mu(B) \leqslant a\} \qquad (B \in \mathscr{B}, a \geqslant 0).$$

在 M 中引进弱拓扑(测度的弱收敛).

取值于$(M,\mathscr{B}^M)$的马尔可夫过程 $X = \{X_t, t \geqslant 0\}$ 称为**测度值分支过程**(简称MB过程),如果它具有**分**支性,即 $\forall \mu, \nu \in M, t \geqslant 0$,

$$P(t,\mu,\cdot) * P(t,\nu,\cdot) = P(t,\mu+\nu,\cdot),$$

其中 $P(t,\mu,A), \mu \in M, A \in \mathscr{B}^M, t \geqslant 0$,为 X 的转移概率;$*$ 表测度的卷积运算.

以 $b(B)$ 表示定义在 $\mathbf{R}$ 上的有界 $\mathscr{B}$ 可测函数集,记$\langle \mu, f \rangle = \int_{\mathbf{R}} f(x)\mu(\mathrm{d}x)$,分支性等价于

$$\begin{aligned} &E_\mu \exp(-\langle X_t, f\rangle) \cdot E_\nu \exp(-\langle X_t, f\rangle) \\ &= E_{\mu+\nu}\exp(-\langle X_t, f\rangle), \end{aligned}$$

E_μ 表示关于 P_μ 之期望,P_μ 为 $X_0 \equiv \mu$ 时,X 之分布.

$P(t,\mu,\cdot)$ 与其拉普拉斯泛函

$$E_\mu \exp(-\langle X_t, f\rangle) = \int_M \exp(-\langle \nu, f\rangle) P(t,\mu,\mathrm{d}\nu) \qquad (f \geqslant 0, \quad f \in b(M)),$$

相互唯一决定.

MB过程是否是超过程,由下列两个因素决定:

(1) 已给取值于$(\mathbf{R},\mathscr{B})$中的马尔可夫过程 $\xi = \{\xi_t, t > 0\}$,其转移概率函数用 $q(t,x,B)$ 表示,转移算子半群为$\{\mathrm{T}_t, t \geqslant 0\}$,无穷小算子(母元)用 A 表示,设 ξ 不中断,且满足一定条件.

(2) 已给实值函数 $B(x,\lambda), x \in \mathbf{R}, \lambda > 0$,

$$B(x,\lambda) = a(x) - b(x)\lambda - c(x)\lambda^2 - \int_0^\infty (\exp(-\lambda x) - 1 + \lambda u) n(x,\mathrm{d}u), \tag{7-1}$$

其中 $a \geqslant 0, c \geqslant 0$ 及 b 皆为有界连续函数,在无穷远收敛,积分核 $n(x,\mathrm{d}u)$ 满足

$$\int_0^\infty (u \wedge u^2) n(x,\mathrm{d}u) \in b(\mathscr{B}),$$

$B(x,\lambda)$ 称为**分支函数**.

如果对于一切 $\mu \in M, 0 \leqslant f \in b(\mathscr{B})$,有

$$E_\mu \exp(-\langle X_t, f\rangle) = \exp(-\langle \mu, V_t\rangle),$$

则称取值于$(M,\mathscr{B}^M)$中的马尔可夫过程 $X = \{X_t, t \geqslant 0\}$ 为(ξ, B)**超过程**.其中 V_t 是下列积分方程的唯一解(上述方程体现了 X 具有分支性):

$$V_t(x) = \int_0^t (\mathrm{T}_s B(\cdot, V_{t-s}(\cdot)))(x)\mathrm{d}s + \mathrm{T}_t f(x).$$

它可改写为

$$V_t(x) = \int_0^t \int_{\mathbf{R}} q(s,x,\mathrm{d}y) B(y, V_{t-s}(y)\mathrm{d}s + \mathrm{T}_t f(x).$$

上述积分方程在形式上等价于偏微分方程

$$\begin{cases} \dfrac{\partial V_t(x)}{\partial t} = \mathrm{A} V_t(x) + B(x, V_t(x)), \\ V_0(x) = f(x). \end{cases}$$

如果 ξ 为布朗运动,则也称 X 为**超布朗运动**;如果 ξ 为扩散过程,则称 X 为**超扩散过程**等等.

一个重要的特殊分支函数是

$$B(x,\lambda) = -\lambda^2,$$

这时 V_t 所满足的方程特殊化为

$$V_t(x) + \int_0^t \mathrm{T}_s V_{t-s}^2(x)\mathrm{d}s = \mathrm{T}_t f(x).$$

7.3　超过程的直观意义

设想粒子群在 $t=0$ 时按强度为 $\mu \in M$ 的泊松点过程分布,即

$$P(\pi_\mu(B) = n) = \frac{[\mu(B)]^n}{n!}\exp(-\mu(B)) \qquad (n = 0,1,2,\cdots),$$

其中 $\pi_\mu(B)$ 表示 $t=0$时位于 B 中的粒子数.设每一粒子沿 ξ 的轨道运动,其寿命是随机的,遵从参数为 ν 的指数分布,一粒子死亡后立即在死亡地点 x 产生 n 个同样后代粒子的概率设为 $p_n(x)$, $n = 0,1,2,\cdots$ 每一新的粒子又沿 ξ 的轨道同样地相互独立运动;如此继续.设每一粒子有质量 β,以 $\pi_\mu(t,B)$ 表示 t时位于B中的粒子数,则

$$X_t^\beta(B) = \beta\pi_\mu(t,B)$$

为 t 时位于 B 中诸粒子的质量和. 令

$$\varphi(x,\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n(x)\lambda^n.$$

今取 $r_\beta = 1/\beta, \mu_\beta = \mu/\beta$, 令 $\beta \to 0$, 从而平均寿命 $1/\gamma_\beta \to 0$, 强度 $\mu_\beta \to \infty$. 设产生新粒子个数的分布 $p_n(x)$ 也与 β 有关, 则其相应的母函数用 $\varphi_\beta(x,\lambda)$ 表示. 再设对于任意 $C > 0$,

$$-\frac{1}{\beta^2}[\varphi_\beta(x,1-\beta\lambda) - (1-\beta\lambda)] \to B(x,\lambda)$$

在 $\mathbf{R}x[0,c]$ 中一致成立. 在这些条件下, 如果对于一切 $\beta > 0$, 存在 $C > 0$, 使

$$\sum_{n=0}^{\infty} np_n^{\beta}(x) \leqslant C,$$

则可以证明, 测度值过程 $(X_t^\beta, P_{\beta\pi_{\mu/\beta}})$ 弱收敛于 (X_t, P_μ). 此时 $B(x,\lambda)$ 表达式(7-1)中的 $a(x) \equiv 0$.

参 考 文 献

1 王梓坤著. 随机过程通论(上、下). 北京:北京师范大学出版社, 1996.
2 李漳南, 吴荣著. 随机过程教程. 北京:高等教育出版社, 1987.
3 《数学百科全书》编译委员会. 数学百科全书. 北京:科学出版社, 1995 ~ 1997.
4 《中国大百科全书》编委会编. 中国大百科全书. 数学卷. 北京:中国大百科全书出版社, 1988.
5 严加安编著. 鞅与随机积分引论. 上海:上海科学技术出版社, 1981.
6 吴德滁, 方兆本. 随机过程. 见:现代工程数学手册编委会. 现代工程数学手册(第Ⅳ卷). 武汉:华中工学院出版社, 1987.
7 严士健著. 无穷粒子马尔可夫过程引论. 北京:北京师范大学出版社, 1989.
8 Liggett T M. Interacting particle systems. New York: Springer-Verlag, 1985.
9 Chen MuFa(陈木法). From Markov chains to non-equilibrium particle systems. Singapore: World Scientific, 1992.
10 Doob J L. Stochastic processes. New York: Wiley, 1953.
11 Ross S M. Stochastic processes. New York: John Wiley & Sons, Inc, 1983.
12 侯振挺. Q 过程的唯一性准则. 长沙:湖南科学技术出版社, 1982.
13 钱敏平, 龚光鲁著. 随机过程论(第 2 版). 北京:北京大学出版社, 1997.

·随机数学卷·

第 13 篇

时间序列分析

编　者　安鸿志
审校者　谢衷洁

目　录

引　言

时间序列分析是统计学的分支之一，主要研究随机数据序列的统计规律，特别侧重于研究序列前后的相互依赖关系.在很多情况下，随机数据是依时间先后排成的数据序列，故称为时间序列.对时间序列的分析，除包括一般统计分析，比如自相关分析和谱分析外，还包括线性模型分析、非线性模型分析和预报分析等内容.时间序列分析的统计方法，多数是借鉴经典的统计方法，因此，它的发展历史在数理统计学中并不算太久，大约有半个世纪.第二次世界大战后，电子计算技术的蓬勃发展，特别地，现代控制论的迅速发展，推动了时间序列分析的发展.其中对平稳时间序列的谱分析、线性时间序列的模型分析等内容的研究和应用，已达到了日趋完善的程度，在文献中已有丰富的理论成果和统计方法，而且也推出了许多通用的软件.近十多年来，非线性科学倍受关注.由于非线性随机动力系统、非线性随机微分方程都与时间序列有密切联系，因而近些年来对非线性时间序列分析的研究越来越受到重视.关于非线性时间序列的理论和统计方法的研究，正处在不断发展和不断完善的过程之中.

时间序列分析在许多领域，比如经济、金融、天文、气象、水文、生物、医学、化工、冶金领域等有着广泛的应用.

1　平稳序列自相关分析

1.1　随机序列与样本序列

时间序列 $x_1, x_2, \cdots$ 中的每个 x_i 都被看做随机变量，所以，时间序列实际上是随机变量序列，或简称**随机序列**.随机序列中不同时刻的 x_i 和 x_j 有一定的相互依赖关系，研究和分析这些关系是时间序列分析的基本内容.

随机序列的观测值 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，是一串数据序列，其长度为 n，被称为**样本序列**.为了简化记号，随机序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 和它的样本序列都用同一记号表示.当强调序列自身时，常用记号 $\{x_t\}$，或 $x_1, x_2, \cdots$；当强调样本序列时，常用 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 表示.在概率论中，随机序列也被称为离散时间的随机过程.若 $\{x(t)\}$ 表示连续时间的随机过程，那么，$\{x_k = x(kh), k = 1, 2, \cdots\}$ 被称为随机过程 $\{x(t)\}$ 的等间隔采样.显然 $x_1, x_2, \cdots$ 是一个时间序列.可见，时间序列与随机过程有着密切联系.由于电子计算机的普遍使用，对连续观测的随机过程进行等间隔采样，可得到样本序列数据；通过对此序列进行时间序列分析，就可以了解原随机过程的统计规律，这是在工程技术领域中经常使用的分析方法.

在实际应用中，也还有许多的时间序列是被直接测量的，而不是连续过程的离散化取样序列．比如，国家历年的粮食产量序列就是这样的时间序列．

从数据分析观点看，时间序列分析实际上是对数据序列进行统计计算分析，但是，所使用的时间序列分析的各种方法，都是以随机序列理论作为基础的．因此，在介绍时间序列分析方法时，总要涉及一些随机过程的概念或理论结果．

1.2 平稳序列与协方差函数

时间序列 $x_1, x_2, \cdots$ 中的每一个 x_t 都是随机变量，那么，描述它们的概率结构应当是概率分布，其重要数量指标有均值 Ex_t 和方差$\sigma_t^2 = E(x_t - Ex_t)^2$．若将 t 看作变量，则 $Ex_t \equiv m_t$ 是 t 的函数，被称为均值函数；类似地 σ_t^2 被称为方差函数．如前所述，研究时间序列的结构时，更关心不同时刻间的相互关系．比如，x_t 和x_s 的相互关系，其中最重要的数量指标为**自协方差函数**

$$\gamma_{t,s} = E(x_t - m_t)(x_s - m_s).$$

由此又可引入 x_t 与 x_s 的**自相关函数**

$$\rho_{t,s} = \frac{\gamma_{t,s}}{(\gamma_{t,t}\gamma_{s,s})^{1/2}}.$$

以上描述方法都是熟知的统计学的简单方法．但是，当讨论 $\gamma_{t,s}$ 或$\rho_{t,s}$ 随 t 和 s 变化的函数关系时，情况就十分复杂了．况且，$\gamma_{t,s}$ 和$\rho_{t,s}$ 并不是对任何时间序列而言都是可以估计的．为了保证这些量能够用时间序列的样本序列来估计，下面先介绍**平稳序列**概念．

定义 1 时间序列$\{x_t\}$ 被称为**宽平稳**的，如果 $Ex_t^2 < \infty$，而且，

1° $m_t = Ex_t = m$ 与 t 无关，

2° $\gamma_{t,s} = E(x_t - m)(x_s - m) = \gamma_{t-s}$，

其中 γ_{t-s} 为只与 $t-s$ 有关的一元函数．

定义 2 时间序列$\{x_t\}$ 被称为**严平稳**的，如果对于任何正整数 $k(t_1 < t_2 < \cdots < t_k)$ 和 j，$(x_{t_1}, x_{t_2}, \cdots, x_{t_k})$ 与$(x_{t_1+j}, x_{t_2+j}, \cdots, x_{t_k+j})$ 有相同的联合分布．

严平稳性和宽平稳性有如下的两点重要关系：其一，如果时间序列$\{x_t\}$ 是严平稳的，而且 $Ex_t^2 < \infty$，那么它也是宽平稳的；其二，如果时间序列$\{x_t\}$ 的任何有限个变量的联合分布都是正态的，那么以上两种平稳性是等价的．

为了使本篇的讨论简练，以下提到平稳序列时，总是指同时具有两种平稳性，并简单称为平稳序列．

随机序列包含的序列非常广泛，平稳序列只是随机序列的一种特殊类型，但是，平稳序列具有非常普遍的实际背景，而且又有比较完善的理论基础，这使得平稳序列在时间序列分析中占有重要地位．或者说，迄今为止具有应用价值的时间序列分析方法中，绝大多数直接或间接地与平稳序列有联系．

在平稳序列中，最简单而又最基本的是白噪声序列，或简称**白噪声**，记为$\{\varepsilon_t\}$，其中 ε_t 为相互独立、相同分布的随机序列，且 $E\varepsilon_t = 0, E\varepsilon_t^2 = \sigma^2$．在工程技术领域

中,白噪声是被普遍使用的术语,有时也与上述的假定有些区别,在本篇论述中只采用以上的定义.由此定义的白噪声$\{\varepsilon_t\}$,其概率分布结构被ε_t的分布F_ε唯一确定.特别是当F_ε为正态分布时,称$\{\varepsilon_t\}$为**正态白噪声**.正态白噪声在时间序列分析中具有非常重要的地位,其原因至少有以下两点:许多重要的平稳序列是由白噪声或正态白噪声变换产生的;正态白噪声在研究各种统计方法时起着重要作用.

平稳序列的自协方差函数γ_t和自相关函数ρ_t有如下简单性质:

1° $\gamma_k = \gamma_{-k}$, $\rho_k = \rho_{-k}$;

2° $|\gamma_k| \leqslant \gamma_0$, $|\rho_k| \leqslant 1$;

3° 对于任何正整数k和任何实数$c_1, c_2, \cdots, c_k$,均有

$$\sum_{i,j=1}^{k} c_k c_j \gamma_{i-j} \geqslant 0.$$

上式表明以下的对称方阵是非负定的,即

$$\begin{bmatrix} \gamma_0 & \gamma_1 & \cdots & \gamma_{k-1} \\ \gamma_1 & \gamma_0 & \cdots & \gamma_{k-2} \\ \cdots & \cdots & & \cdots \\ \gamma_{k-1} & \gamma_{k-2} & \cdots & \gamma_0 \end{bmatrix} \geqslant 0.$$

对于白噪声序列$\{\varepsilon_t\}$,有

$$\gamma_k = E\varepsilon_t \varepsilon_{t+k} = 0,$$

对于一切$k \neq 0$成立,

$$\gamma_0 = \sigma^2 = E\varepsilon_t^2.$$

1.3 平稳序列的自相关分析

如前所述,白噪声是一种特殊的平稳序列,由零均值的独立同分布的随机变量组成,所以,白噪声的概率结构十分简单,且被ε_t的分布唯一决定.利用白噪声的样本序列,ε_t的分布也是可以被估计的,其估计的理论与方法属于经典统计的基本内容.但是,对于一般序列而言,使用最多的仍是关于序列的自协方差函数的估计.对于白噪声而言,需要根据其自相关函数ρ_k的估计值,判断ρ_k是否为零值($k \neq 0$).

对于一般平稳序列来说,掌握和估计它的概率分布结构远比掌握估计白噪声困难.因此,通过对平稳序列的自协方差函数和自相关函数的估计,以了解序列的相依结构,是一种简单的初步分析方法.具体方法如下.

记$x_1, x_2, \cdots, x_n$为观测到的数据序列,则其均值

$$\overline{x}_n = \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n} x_t; \tag{1-1}$$

样本自协方差函数值

$$\widehat{\gamma}_k = \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n-k}(x_t - \overline{x}_n)(x_{t+k} - \overline{x}_n) \qquad (k = 0,1,2,\cdots,n-1); \tag{1-2}$$

样本自相关函数值

$$\hat{\rho}_k = \frac{\hat{\gamma}_k}{\hat{\gamma}_0} \qquad (k = 1,2,\cdots,n-1). \tag{1-3}$$

从统计学角度看，$\hat{\rho}_k$ 描述了 x_t 与 x_{t+k} 的相关程度. 根据平稳性，$\hat{\rho}_k$ 的真值 ρ_k 是与 t 无关的，所以式(1-3)中 $\hat{\rho}_k$ 可作为 ρ_k 的估计. 类似地，以上计算出的样本自协方差函数可作为自协方差函数的估计. 如果这些估计随着样本长度 n 无限增加时，分别趋于各自被估计的量，则称这些估计是相容的. 显然，不相容的估计在实际应用中难以被接受. 除了相容性以外，渐近正态分布性质，以及渐近分布的方差的近似公式，在应用中也起着重要的作用.

定理 1　若平稳序列 $\{x_t\}$ 为白噪声的加权和，即

$$x_t = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j \varepsilon_{t-j} \qquad \left(\sum_{j=-\infty}^{\infty} |c_j| < \infty\right), \tag{1-4}$$

其中 $\{\varepsilon_t\}$ 为白噪声序列，而且 $E\varepsilon_t^4 < \infty$，那么，对于任意正整数 k，有

$$\sqrt{n}(\hat{\gamma}_0 - \gamma_0, \hat{\gamma}_1 - \gamma_1, \cdots, \hat{\gamma}_k - \gamma_k) \sim N(0, \boldsymbol{G}),$$

其中记号 ~ 表示渐近分布；$\boldsymbol{G}$ 为 $(k+1)\times(k+1)$ 阶的对称协方差阵，其第 $i+1$ 行 $j+1$ 列的元素

$$g_{i+1,j+1} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} (\gamma_{s+i}\gamma_{s+j} + \gamma_{s-i}\gamma_{s+j}) + \frac{\mu_4 - 3\sigma^4}{\sigma^4}\gamma_i\gamma_j \qquad (0 \leqslant i,j \leqslant k), \tag{1-5}$$

其中 $\mu_4 = E\varepsilon_t^4$.

类似地，还有

$$\sqrt{n}(\hat{\rho}_1 - \rho_1, \hat{\rho}_2 - \rho_2, \cdots, \hat{\rho}_k - \rho_k) \sim N(0, \boldsymbol{R}),$$

其中 $\boldsymbol{R}$ 为 $k\times k$ 阶对称方阵，其第 i 行 j 列的元素

$$\gamma_{i,j} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} (\rho_{s+i}\rho_{s+j} + \rho_{s-i}\rho_{s+j} + 2\rho_s^2\rho_i\rho_j - 2(\rho_s\rho_i\rho_{s+i} + \rho_s\rho_j\rho_{s+j})). \tag{1-6}$$

根据定理 1 可知，γ_k 的估计 $\hat{\gamma}_k$ 是相容的，$\hat{\rho}_k$ 也是相容的.

在一定的条件下，定理 1 的条件式(1-4)可以放宽，比如在近代统计中常用 $\{x_t\}$ 满足某种意义的混合条件代替式(1-4)[7]，这样便使后文中的非线性序列也适用此定理结果. 由于这些内容涉及较多概率论知识，这里不作具体讨论.

根据定理 1 的结果，当样本长度 n 很大时，$\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2, \cdots, \hat{\rho}_k$ 分别与 $\rho_1, \rho_2, \cdots, \rho_k$ 很接近. 因此，可将 $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2, \cdots, \hat{\rho}_k$ 绘在坐标上，以 $k = 1,2,\cdots,K$ 为横坐标，$\hat{\rho}_k$ 为纵坐标，其中 K 是比 n 小的正整数. 这样可以观察 $\hat{\rho}_k$ 随 k 增加时的变化趋势. 结合后文中介绍的各种不同类型的序列特征，这种变化趋势将有助于判断原序列的类型.

对于白噪声而言，定理 1 可以直接用来判断样本序列是否为白噪声的样本，具体作法如下：由定理 1 知，若 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 是白噪声的样本序列，那么式(1-6)变为

$$\gamma_{i,j} = 0 \qquad (i \neq j),$$

于是由 $\rho_j=0$ 和 $\sqrt{n}(\widehat{\rho}_1,\widehat{\rho}_2,\cdots,\widehat{\rho}_k)\sim N(0,\mathbf{R})$ 知，$\widehat{\rho}_i$ 渐近正态 $N(0,1)$ 分布，而且 $\widehat{\rho}_i$ 与 $\widehat{\rho}_j(i\neq j)$ 渐近独立．由此可得

$$\widehat{\rho}_1^2+\widehat{\rho}_2^2+\cdots+\widehat{\rho}_k^2\sim\chi^2(k),\tag{1-7}$$

其中 $\chi^2(k)$ 表示自由度为 k 的 χ^2 分布；正整数 k 是比 n 小得多，且适当选定的值．在给出置信水平后，根据式(1-7)可以用假设检验方法判断 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 是否为白噪声序列的样本．

在获得了序列的自协方差函数和自相关函数的估计后，即使不再进行后文中的各种模型分析，利用被估计的自协方差函数和自相关函数，也可以对序列的预报分析或谱分析作初步估算．具体细节可见后文中的有关内容．

2　谱　分　析

时间序列分析可以分为时域分析和频域分析两类．时域分析强调序列在不同时刻的相互依赖关系，统计方法也侧重于与时间有关的诸量的统计计算．比如前一章中的自相关分析，以及后面的各章中的模型分析，都属于时域分析．时间序列的频域分析强调分析序列的谱分解的特征，其统计内容和方法侧重于与频率或谱有关的诸量．本章的内容就属于时间序列的频域分析．

2.1　谱分布与谱密度

平稳序列的谱表示理论是时间序列谱分析的理论基础．这里不从理论角度详细介绍这方面的内容，而只用较直观的方法描述时间序列的谱表示的含义．

时间序列的谱表示与周期序列有关系，更确切地说与三角函数有关系．比如，序列

$$x_t=\alpha\sin(\gamma t)\qquad(t=1,2,\cdots),$$

其中 α 和 γ 是常数，x_t 恰好是一个正弦函数在 $t=1,2,\cdots$ 时刻的取值．在工程技术领域中，$\sin(\gamma t)$ 被称为正弦波．如果系数 α 被一个随机变量代替，$x_t=\alpha\sin(\gamma t)$ 便是一个随机序列．这一表达式可推广到无穷多项之和的形式，即

$$x_t=\sum_{k=-\infty}^{\infty}\alpha_k\sin(\gamma_k t),\tag{2-1}$$

其中 γ_k 为常数；α_k 为随机变量，而且对于不同 k 而言是相互独立的．虽然式(2-1)中的每项都是周期的正弦波，但是，无穷多项的随机加权和，就不再明显地表现出谐波式周期特征了．在平稳过程的理论中，对式(2-1)有严格的讨论，而且还可以将它推广到如下的积分形式：

$$x_t=\int_{-\pi}^{\pi}\exp(\mathrm{i}t\lambda)\mathrm{d}z(\lambda),\tag{2-2}$$

其中 $z(\lambda)$ 为一独立(或正交)增量过程．这里介绍式(2-1)和式(2-2)，只希望对理

解时间序列的谱概念有所启示,本章并不具体使用这些表达式.

在平稳序列的谱分析中,实际上涉及到的是自协方差函数的谱表示.虽然这种谱表示与式(2-2)有联系,但是,也可以直接定义自协方差函数 γ_k,γ_k 可表达成如下形式:

$$\gamma_k = \int_{-\pi}^{\pi} \exp(ik\lambda) f(\lambda) d\lambda, \tag{2-3}$$

其中 f 为一非负可积函数,它与熟知的分布密度函数只差一个常数因子.称式(2-3)为 γ_k 的谱表示,$f(\lambda)$ 被称为 γ_k 的**谱密度**,有时也称它为序列的谱密度.如果记

$$F(\lambda) = \int_{-\pi}^{\lambda} f(s) ds, \tag{2-4}$$

则称 $F(\lambda)$ 为谱分布.于是,式(2-3)还可以表达成

$$\gamma_k = \int_{-\pi}^{\pi} \exp(ik\lambda) dF(\lambda).$$

为了不引入太多的概念,本章只讨论具有式(2-4)关系的谱分布.换言之,虽然平稳序列的自协方差函数总能表达成式(2-4)的形式,但是为了能表达成式(2-3)的形式,需要一定的附加条件.在本章所讨论的平稳序列中,绝大多数都满足所需要的附加条件.下面举出一个容易被检验的充分条件,以有助于了解式(2-3)的直接含义.例如,当

$$\sum_{k=0}^{\infty} |\gamma_k| < \infty \tag{2-5}$$

时,必有

$$f(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \gamma_k \exp(-ik\lambda). \tag{2-6}$$

通过简单积分运算,即可验证上式中的 $f(\lambda)$ 满足式(2-3).联合式(2-6)和式(2-3)可看出,$\{\gamma_k\}$ 和 $f(\lambda)$ 具有一一对应的关系.这一关系充分说明,用 $\{\gamma_k\}$ 描述平稳序列的结构特征,与用 $f(\lambda)$ 描述是等价的.或者说,虽然两种描述方法的角度不同,但是所描述的时间序列结构的内涵是相同的.

2.2　周　期　图

在时间序列的谱分析中,最基本的统计量是**周期图**.记 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 为一时间序列的样本,其周期图被定义为

$$I(\omega) = \frac{1}{2\pi n} \left| \sum_{t=1}^{n} x_t \exp(it\omega) \right|^2 \qquad (\omega \in [-\pi, \pi]), \tag{2-7}$$

在实际应用中,有时只对 ω 的一些离散点处计算 $I(\omega)$ 之值,例如在

$$\omega_j = \frac{2\pi j}{n} \qquad (-m_n \leqslant j \leqslant M_n)$$

处,其中 m_n 和 M_n 为两个正整数,常用的 $m_n = M_n = [n/2]$,这里[·]表示最大正整

数部分. 计算在 ω_j 处的 $I(\omega_j)$ 值,可以使用快速傅里叶(J. B. Fourier)变换(FFT)方法.

式(2-7)的周期图 $I(\omega)$ 还有如下的表达形式:

$$\begin{aligned} I(\omega) &= \frac{1}{2\pi n}\sum_{t=1}^{n-|k|}\sum_{s=1}^{n}x_t x_s \exp(\mathrm{i}(t-s)\omega) \\ &= \frac{1}{2\pi n}\sum_{k=-n+1}^{n-1}\sum_{t=1}^{n-|k|}x_t x_{t+|k|}\exp(-\mathrm{i}k\omega) \\ &= \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-n+1}^{n-1}\widehat{\gamma}_k \exp(-\mathrm{i}k\omega), \end{aligned} \tag{2-8}$$

其中 $\widehat{\gamma}_k$ 是由式(1-2)定义的样本自协方差函数值. 式(2-8)说明了样本自协方差函数值与周期图的联系.

在式(2-5)的条件下易见,当 $n \to \infty$ 时,

$$E\widehat{\gamma}_k = \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n-k}Ex_t x_{t+k} = \frac{n-k}{n}\gamma_k \to \gamma_k \qquad (k \geqslant 0), \tag{2-9}$$

于是,联合上式和式(2-5)、式(2-8)可知,当 $n \to \infty$ 时,

$$EI(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-n+1}^{n-1}E\widehat{\gamma}_k \exp(-\mathrm{i}k\omega) \to \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-\infty}^{\infty}r_k \exp(-\mathrm{i}k\omega) = f(\omega). \tag{2-10}$$

上式说明,平稳序列的周期图是谱密度的**渐近无偏估计**. 但是,渐近无偏性并不说明 $I(\omega)$ 是 $f(\omega)$ 的一种好的估计,以下的性质将有助于说明这一点. 记 $\widetilde{\gamma}_k = \widehat{\gamma}_k - \gamma_k$,并使用式(2-6),可得

$$I(\omega) - f(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-n+1}^{n-1}\widetilde{\gamma}_k \exp(-\mathrm{i}k\omega) + \frac{1}{2\pi}\sum_{|k|>n}\gamma_k \exp(-\mathrm{i}k\omega). \tag{2-11}$$

利用式(2-5),上式右边第二项将趋于零,从而上式又可写成:

$$I(\omega) - f(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-n+1}^{n-1}\widetilde{\gamma}_k \exp(-\mathrm{i}k\omega) + o(1).$$

由上式可得

$$E\{I(\omega) - f(\omega)\}^2 = \frac{1}{(2\pi)^2}\sum_{k=-n+1}^{n-1}\sum_{j=-n+1}^{n-1}E(\widetilde{\gamma}_k \cdot \widetilde{\gamma}_j)\exp(-\mathrm{i}(k-j)\omega) + o(1). \tag{2-12}$$

粗略地说,依式(1-5)知,上式中的 $E(\widetilde{\gamma}_k, \widetilde{\gamma}_j)$ 与 $1/n$ 是同阶的. 但是,上式右边的求和项有 n^2 项. 经过仔细的估算可知,上式右边近似于某个常数,这说明 $I(\omega)$ 不是 $f(\omega)$ 的相容估计.

为了寻找相容的谱密度估计,借鉴以上分析结果,引进如下的估计:

$$\widehat{I}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-m_n}^{m_n}\widehat{\gamma}_k \exp(-\mathrm{i}k\omega), \tag{2-13}$$

其中 m_n 是随 n 增加的正整数,例如 m_n 是与 $\log n$ 成正比的正整数. 对比式(2-8)和

式(2-13)可以看出,在式(2-13)中只用了一小部分$\hat{\gamma}_k$的值.这样修正的估计$\hat{I}(\omega)$有怎样的性质呢?依类似于式(2-10)的推理可知,当$n \to \infty$时,

$$E\hat{I}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-m_n}^{m_n} E\hat{\gamma}_k \exp(-\mathrm{i}k\omega) \to f(\omega),$$

相应于式(2-12),有

$$E|I(\omega) - f(\omega)|^2 = \frac{1}{(2\pi)^2}\sum_{k=-m_n}^{m_n}\sum_{j=-m_n}^{m_n} E(\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_j)\exp(-\mathrm{i}(k-j)\omega) + o(1).$$

观察上式右边,并对比(1-12)式可知,由于m_n比n小得多,所以,只要取m_n^2比n为高阶小,上式右边仍可趋于零值.这样就既保证了$\hat{I}(\omega)$为$f(\omega)$的渐近无偏估计,又保证了相容性.这一思路正是下一小节中加权估计的基本思想.

2.3　谱密度加权估计

2.3.1　时窗方法

式(2-13)右边可以看成是对式(2-8)右边加权后的结果,即

$$\hat{I}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-n+1}^{n-1}\hat{\gamma}_k w_{k,n}\exp(-\mathrm{i}k\omega), \tag{2-14}$$

其中权函数$w_{k,n} = 1$,对于$|k| \leqslant m_n$;$w_{k,n} = 0$,对于其他的k.这好似对样本自协方差函数$\hat{\gamma}_{-n+1}, \hat{\gamma}_{-n+2}, \cdots, \hat{\gamma}_{n-1}$加了一个窗口,只在窗口内的$\hat{\gamma}_k(|k| \leqslant m_n)$才进入了式(2-14)右边的求和项.故这种方法可称为时窗方法.

以上的方法可以推广到一般形式.选择适当的权函数h,使之满足

1° $h(u) \geqslant 0$;

2° $h(u) = h(-u)$;

3° $\int h(u)\mathrm{d}u < \infty$.

再选取适当的正整数H_n,使之满足

$$H_n \to \infty \quad (\text{当}\ n \to \infty\ \text{时}).$$

计算$\hat{f}_h(\omega)$,

$$\hat{f}_h(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-n+1}^{n-1} h\left(\frac{k}{H_n}\right)\hat{\gamma}_k\exp(-\mathrm{i}k\omega), \tag{2-15}$$

称$\hat{f}_h(\omega)$为$f(\omega)$的**时窗估计**,$h(u)$为**时窗函数**.对比式(2-14)和式(2-15)可知,相应于式(2-14)中的$w_{k,n} = h\left(\frac{k}{H_n}\right)$.当然,在以上的时窗估计中,时窗函数和正整数$H_n$的选择是很重要的问题.下一小节将列举几种常用的窗函数.

2.3.2　谱窗方法

首先给出前一节中的时窗估计的另一种表达形式. 为此,先记

$$H_n(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{t=-n+1}^{n-1} h\left(\frac{t}{H_n}\right)\exp(-\mathrm{i}t\omega), \tag{2-16}$$

其中 h 函数与式(2-15)中的 h 函数相同. 易见,

$$h\left(\frac{t}{H_n}\right) = \int_{-\pi}^{\pi} H_n(\omega)\exp(\mathrm{i}t\omega)\mathrm{d}\omega.$$

联合以上两式,并注意用式(2-7),可知,

$$\begin{aligned}\hat{f}_h(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} H_n(\lambda)\sum_{k=-n+1}^{n-1}\hat{\gamma}_k\exp(-\mathrm{i}k(\omega-\lambda))\mathrm{d}\lambda \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} I(\omega-\lambda)H_n(\lambda)\mathrm{d}\lambda.\end{aligned} \tag{2-17}$$

在上式中,当 $|\omega-\lambda|>\pi$ 时,以 $I(\omega-\lambda)$ 的周期外延定义其取值,即

$$I(\omega-\lambda) = I(\omega-\lambda\pm 2\pi).$$

由此可见,$\hat{f}_h(\omega)$ 又可看作是对 $I(\omega)$ 的加权积分的结果. 因此,$\hat{f}_h(\omega)$ 又被称为**谱窗估计**,称 $H_n(\omega)$ 为**谱窗函数**,或简称谱窗. 以上式(2-16)告诉人们,谱窗 $H_n(\omega)$ 是由时窗 $h(u)$ 变换而来的.

下面介绍几种常用的窗函数.

1. 矩形窗

$$\begin{cases} h(u) = 1, 当\ |u| \leqslant 1\ 时; \\ h(u) = 0, 当\ |u| > 1\ 时. \end{cases}$$

依式(2-16)知,相应的 $H_n(\omega)$ 为

$$H_n(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{t=-H_n}^{H_n}\exp(\mathrm{i}t\omega) = \frac{\sin\left(\left(H_n+\frac{1}{2}\right)\omega\right)}{2\pi\sin\left(\frac{1}{2}\omega\right)} \equiv D_H(\omega). \tag{2-18}$$

于是相应的谱窗估计为

$$\hat{f}_h(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-H_n}^{H_n}\hat{\gamma}_k\exp(-\mathrm{i}k\omega) = \int_{-\pi}^{\pi} I(\omega-\lambda)D_H(\lambda)\mathrm{d}\lambda.$$

2. 图戈伊(Tukey)窗

$$h(u) = \begin{cases} \frac{1}{2}(1+\cos\pi u) & (|u|\leqslant 1), \\ 0 & (其他\ u), \end{cases}$$

相应的 $H_n(\omega)$ 为

$$H_n(\omega) = \frac{1}{2}D_H(\omega) + \frac{1}{4}D_H\left(\omega-\frac{\pi}{H_n}\right) + \frac{1}{4}D_H\left(\omega+\frac{\pi}{H_n}\right),$$

其中 $D_H(\omega)$ 由式(2-18)定义. 相应的谱窗估计为

$$\widehat{f}_h(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-H_n}^{H_n} \frac{1}{2}\widehat{\gamma}_k\left(1+\cos\frac{k\pi}{H_n}\right) = \int_{-\pi}^{\pi} I(\omega-\lambda)H_n(\lambda)\mathrm{d}\lambda.$$

3.帕泽恩(Parzen)窗

$$h(u) = \begin{cases} 1-6u^2+6|u|^3 & \left(|u| \leqslant \frac{1}{2}\right), \\ 2(1-|u|)^3 & \left(\frac{1}{2} < |u| < 1\right), \\ 0 & (\text{其他}). \end{cases}$$

相应的谱窗 $H_n(\omega)$ 为

$$H_n(\omega) = \frac{2+\cos\omega}{2\pi H_n^3}\left(\frac{\sin\left(\frac{H_n\omega}{4}\right)}{\sin\left(\frac{\omega}{4}\right)}\right)^4.$$

将上式代入式(2-17)即可得 $\widehat{f}_h(\omega)$.

关于其他谱窗可参见文献[1].

在使用谱窗方法时,如何选择时窗宽 H_n 是比较困难的问题.当 H_n 太大时,响应的 $\widehat{f}_h(\omega)$ 的随机误差较大;当 H_n 太小时,相应 $\widehat{f}_h(\omega)$ 的均值偏差(又称系统偏差)较大.要解决这一问题,必须结合实际背景知识和一定的经验反复探索.

2.3.3 数据窗方法

许多实际应用和模拟计算表明,对于观测到的时间序列数据 $x_1,x_2,\cdots,x_n$,同样可以使用加窗的处理方法,并能起到改进谱密度估计偏度的作用.尤其当样本长度 n 不太大时,使用数据窗方法会有明显的改进效果.

所谓数据窗方法,就是在计算数据序列 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的周期图时,采用以下的加权形式:

$$I_h(\omega) = \frac{1}{2\pi n}\left|\sum_{t=1}^{n} h\left(\frac{t}{n}\right)x_t\exp(-\mathrm{i}t\omega)\right|^2,$$

其中 h 函数为**数据窗函数**.使用了数据窗的周期图 I_h 后,一般还要使用前述的谱窗方法得到谱窗估计.两种窗方法相互结合使用,可改进谱估计.

常使用的数据窗有如下两种.

1.梯形窗

$$h(u) = \begin{cases} \frac{u}{b} & (0 \leqslant u \leqslant b), \\ 1 & (b < u < 1-b), \\ \frac{(1-u)}{b} & (1-b \leqslant u \leqslant 1). \end{cases}$$

2. 钟形窗

$$h(u)=\begin{cases}\dfrac{1-\cos(2\pi u\gamma)}{2} & (0\leqslant u\leqslant\dfrac{1}{2\gamma}),\\ 1 & (\dfrac{1}{2\gamma}<u<\dfrac{1}{2}),\\ h(1-u) & (\dfrac{1}{2}\leqslant u\leqslant 1),\end{cases}$$

其中 γ 为大于1的常数,一般取 $\gamma=n^{\alpha},\alpha\in(0,1/6)$.

2.4 隐含周期的估计

在气象、水文和经济等许多领域中,某些按月记录的数据序列有明显的周期变化规律.描述这种周期变化规律的时间序列的方法有几种.比如将在第三章介绍的季节模型和周期相关模型,就是描述这种周期变化规律的时间序列的模型描述方法.在这一节里,将介绍隐含周期描述方法.这种方法将上述的时间序列分解为谐波函数与平稳序列之和,即

$$x_t=\sum_{j=1}^{p}(a_j\cos(\theta_j t)+b_j\sin(\theta_j t))+\varepsilon_t,\tag{2-19}$$

其中 ε_t 为平稳序列.以下为了叙述简便,这里假定 ε_t 为白噪声序列;a_j, b_j 和 θ_j 为实值参数.由于式(2-19)中的 ε_t 是不可观测的误差项,所以 x_t 呈现的周期性被干扰了,或者说被隐含了,故称式(2-19)为隐含周期**模型**.根据数据 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 对式(2-19)进行统计分析,属于隐含周期估计的内容.

2.4.1 指定频率的谐波检测与估计

在某些实际应用中,式(2-19)中的频率参数 $\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_p$ 和个数 p 是已知的,或被指定的.此时,需要根据数据 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 判断式(2-19)中的系数 a_j 和 b_j 是否全为零.换言之,需要判断 x_t 是否有隐含周期项.为解决这样的判断问题,考虑以下的对立假设检验问题:

$$H_0: a_j=b_j=0, j=1,2,\cdots,p;$$
$$H_1: a_j,b_j(j=1,2,\cdots,p)\text{ 不全为零}.$$

为解决这样的假设检验问题,引入以下记号:

$$\boldsymbol{c}_0=\sqrt{\frac{1}{n}}(1,1,\cdots,1)^{\mathrm{T}},$$

$$\boldsymbol{s}_j=\sqrt{\frac{2}{n}}(\sin\theta_j,\sin(2\theta_j),\cdots,\sin(n\theta_j))^{\mathrm{T}}\qquad(j=1,2,\cdots,p),$$

$$\boldsymbol{c}_j=\sqrt{\frac{2}{n}}(\cos\theta_j,\cos(2\theta_j),\cdots,\cos(n\theta_j))^{\mathrm{T}}\qquad(j=1,2,\cdots,p),$$

$$\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{c}_0,\boldsymbol{c}_1,\boldsymbol{c}_2,\cdots,\boldsymbol{c}_p,\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\cdots,\boldsymbol{s}_p],$$

$$\boldsymbol{\xi}=\left(0,a_1\sqrt{\frac{n}{2}},a_2\sqrt{\frac{n}{2}},\cdots,a_r\sqrt{\frac{n}{2}},b_i\sqrt{\frac{n}{2}},\cdots,b_p\sqrt{\frac{n}{2}}\right)^{\mathrm{T}},$$

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T,$$
$$\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)^T,$$

其中上标T表示矩阵或矢量的转置；A 是由列矢量 $c_0, c_1, \cdots, c_p$ 和 $s_1, s_2, \cdots s_p$ 形成的矩阵；在矩阵 A 和参考矢量 ξ 中引入 c_0 和 $\xi_0 = 0$，是为了解决 x_t 的均值 Ex_t 带有常数项的问题. 如果实际问题中 x_t 确实带非零常数项的式(2-19)，即式(2-19)右边增加常数项 a_0，则在上述定义的矢量 ξ 中的第一分量 $\zeta_0 = a_0$. 此时式(2-19)可以写成如下的矩阵形式：

$$X = A\xi + \varepsilon, \tag{2-20}$$

这是典型的线性回归矩阵形式. 因此，在假定 ε_t 为白噪声而且具有正态分布时，依回归分析的熟知结果可知，当 H_0 成立时，

$$F_n = \frac{(n-2p-1)\|A\hat{\xi} - \sqrt{n}\,\bar{x}c_0\|^2}{2p\|X - A\hat{\xi}\|^2} \sim F_{2p,n-2p-1}, \tag{2-21}$$

其中 $F_{2p,n-2p-1}$ 为 F 分布，其 $2p$ 为第一自由度，$n-2p-1$ 为第二自由度；$\bar{x}$ 为样本均值，按式(1-1)计算；$\hat{\xi}$ 为 ξ 的最小二乘估计，即

$$\hat{\xi} = [A^TA]^{-1}A^TX. \tag{2-22}$$

对于给定的置信水平 α(比如 $\alpha = 0.05$)，使用分布表可查出相应的临界值 F_α，使

$$P(F_{2p,n-2p-1} > F_\alpha) = \alpha.$$

于是，当计算值 $F_n > F_\alpha$ 时，否定原假设 H_0；否则，不否定原假设. 此时可以认为接受对立假设.

在假设检验中不否定 H_0 时，或者根据实际背景直接认定数据序列满足式(2-19)模型时，需要对式(2-19)中的未知参数 a_j 和 b_j 进行估计. 事实上，在上述分析中已经给出过它们的估计公式，这就是式(2-22). 这一公式当然可以用来给出 a_j 和 b_j 的最小二乘估计，即由式(2-22)计算出

$$\hat{\xi} = (\hat{\xi}_0, \hat{\xi}_1, \cdots, \hat{\xi}_\pi, \hat{\xi}_{\pi+1}, \cdots, \hat{\xi}_{2\pi})^T,$$

那么

$$\hat{a}_j = \hat{\xi}_j\sqrt{\frac{2}{n}}, b_j = \hat{\xi}_{j+p}\sqrt{\frac{2}{n}} \qquad (j = 1, 2, \cdots, p).$$

另外，当 Ex_t 中除了有式(2-19)中的三角函数外，还有常数项时，比如此项真值为 a_0，则 $\hat{\xi}_0 = \hat{a}_0$ 可作为 a_0 的估计. 当 Ex_t 恰好是式(2-19)的均值时，即相应的常数项 $a_0 = 0$，则 $\hat{\xi}_0$ 应当是对真值零的估计，其绝对值应该是较小的.

还应指出，在 $\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_p$ 和 p 本身都已知时，式(2-19)是典型的三角函数回归模型，这时可以直接使用回归分析中的方法对 a_j 和 b_j 进行估计，不一定再使用式(2-22)来估计，从理论上说，在这种情况下，这两种估计的结果应当是相同的，这里不一一列举了.

2.4.2 未知频率的估计

在前一小节里，讨论了在频率已知时的参数估计和检验问题. 当然，频率已知

的含义是广泛的,即可以是严格已知,也可以是实际中指定,还包括是利用数据序列估计出来的.下面讨论如何利用样本序列估计未知频率的问题.

1. 已知 $p = 1$

当已知式(2-19)中 $p = 1$ 时,有

$$x_t = a\cos(\theta t) + b\sin(\theta t) + \varepsilon_t \qquad (\theta \in (0,\pi)),$$

如果 a 和 b 不同时为零,则 $Ex_t = a\cos(\theta t) + b\sin(\theta t)$ 为周期函数,且是单周期的简单谐波函数.经过适当的数学推导可知,满足上式的 x_t 的周期图有以下的性质:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{I(\omega)}{n} = \begin{cases} c(\theta) & (w = \theta), \\ 0 & (w \neq \theta), \end{cases} \quad (\text{in } P), \tag{2-23}$$

其中 $c(\theta)$ 表示与 θ 有关的非负常数;"in P"表示依概率意义下收敛.如果 $a = b = 0$,则 $x_t = \varepsilon_t$,此时 $I(\omega)$ 实际上是白噪声的周期图.对此,有如下的大样本特征:

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{\omega} \frac{I(\omega)}{\log n} < \infty. \tag{2-24}$$

上式的证明是繁琐的.但是,通过对比 $a = b = 0$ 和 a, b 不全为零的两种对立情况,可以看出,前者的 $I(\omega)$ 与 n 同阶,后者的 $I(\omega)$ 与 $\log n$ 同阶.这一显著差异是寻找未知频率的理论依据.

在 $p = 1$ 时,记 $\hat{\theta}$ 为如下极值问题之解,即

$$I(\hat{\theta}) = \sup_{0\leqslant\omega\leqslant\pi} I(\omega).$$

根据上述分析,可以相信 $\hat{\theta}$ 是未知参数 θ 的合理估计.理论上证明也的确如此.

2. 已知 $p > 1$

原则上说,解决已知 p 时未知频率的估计问题,对于 $p = 1$ 或 $p > 1$ 并无实质性区别.但是,在具体计算时会遇到一些问题.其原因在于,当 $p = 1$ 时,只须找到 $I(\omega)$ 的极大值点所相应的 $\hat{\theta}$,而在 $p > 1$ 时,面临着如何找出 p 个极大值的问题.初步设想,应当寻找 $\hat{\theta}_j$ 的所有可能的局部极大值点所相应的 $\hat{\theta}_j$,由于 $I(\omega)$ 是连续函数,从理论上讲,这是可行的;再在所有可能的局部极大值中寻找出前 p 个最大者,由于 p 是已知的,这也是可行的;最后,以这 p 个最大的极值所相应的 $\hat{\theta}_j$ 作为 p 个未知频率的估计.

以上设想不仅是在原理上可行的,而且也是现实中常用的.只是还有一点需要在计算中注意,即当上述的 $\hat{\theta}_j$ 中存在着的两个不同 $\hat{\theta}_j$ 非常靠近时,会遇到一些麻烦.尤其是在寻找 $I(\omega)$ 的局部极值时,由于只是依据了 $I(\omega)$ 在有限的离散点 ω_j 处的 $I(\omega_j)$ 之值,更容易遇到上述的麻烦.而实际应用中又多是以 $I(\omega_j)$ 寻找局部极值的,因此,要特别予以注意.那么,当 $\hat{\theta}_j$ 中出现二者十分靠近的情况时,会有怎样的麻烦呢?直观地说,当 $\hat{\theta}_j$ 是 $I(\omega)$ 的局部极值点时,由于 $I(\omega)$ 的连续性,$I(\omega)$ 在 $\omega = \hat{\theta}_j$ 的临域之中的取值也相对较大,甚至于比某些局部极值还大;又由于只在 $I(\omega)$ 的有限个离散值中寻找极大值,很可能出现假的局部极值点.此外,$\hat{\theta}_j$ 本身

就不是真的局部极值点所相应的频率值点，这也会造成上述的麻烦.

为了克服上述现象带来的技术性的麻烦，常用的办法是，在寻找局部极值点时，使得 p 个最大的极大值相应的 $\hat{\theta}_j$ 之间的最相近的距离大于给定的某个正数 σ. 至于此 σ 值的选择问题，则要靠一定的实际经验协助解决.

3. p 未知

当式(2-19) 中 p 值未知时，应当先对 p 作出估计，然后再按上述 p 已知的情况，对未知参数进行估计. 这里仅提出两种确定 p 的方法. 第一种方法是依靠类似于式(2-23) 和式(2-24) 的更精细的理论结果，分析周期图的极值特征，给出 p 的估计. 由于内容稍复杂些，受篇幅所限，这里不再介绍，可参阅文献[1]. 另一种确定 p 的方法被称为极大熵谱方法，它与下一章中将要介绍的自回归阶数估计的方法相同，可见下一章中有关的内容.

3　线性序列参数模型——ARMA 模型

时间序列的自相关分析和谱分析，仅仅刻画了序列的二阶矩的相关结构，而不是全部结构. 或者说，具有完全相同的自协方差函数的序列，其谱分布也自然相同，但是这种序列的更高阶矩的结构，或者其他概率结构，还可以各不相同. 为了进一步描述时间序列的结构特征，本章将讨论线性时间序列中的有限参数模型，它们是自回归滑动平均模型，又简单记为 **ARMA**(autoregressive moving average) 模型. 此外还将介绍与其有关的其他模型.

3.1　ARMA 模型

3.1.1　线性时间序列

前两章所介绍的自相关分析和谱分析，对任何平稳序列都适用，并未涉及序列的其他结构. 在第 1 章中引进白噪声序列时，还指出过，许多重要的平稳序列都是由白噪声序列变换而来的. 在这一章中将要介绍的**线性序列**，就是由白噪声变换而来的. 虽然，下面仍将使用自相关分析和谱分析的基本方法研究此类序列，但是，由于限定了线性平稳序列，其自相关结构能在较大程度上提示出序列的结构特征.

如果平稳序列 $\{x_t\}$ 能有表达形式

$$x_t = \sum_{j=0}^{\infty} \psi_j \varepsilon_{t-j} \qquad \left(\sum_{j=0}^{\infty} \psi_j^2 < \infty, E\varepsilon_t^2 = \sigma^2\right), \tag{3-1}$$

则称其为线性序列. 上式中 ε_t 为白噪声序列. 关于线性序列的定义还有其他不同的公式，这里暂用式(3-1). 上式表明，x_t 是白噪声 ε_t 的延迟滑动加权求和，有时也统称为滑动平均.

显然，线性序列仅是平稳序列中的特殊的一类. 比如，序列

$$x_t = \varepsilon_t \varepsilon_{t-1} \tag{3-2}$$

就不是线性序列.后文中将看到,式(3-2)中的 x_t 是一种非线性平稳序列.

式(3-1)中平稳序列的结构特征被全部系数 ψ_j 和 ε_t 的分布唯一决定.而 ψ_j 又与 x_t 的自协方差函数 γ_k 有如下的关系:

$$\begin{aligned}\gamma_k &= Ex_t x_{t+k} = \sum_{i=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{\infty}\psi_j\psi_i E(\varepsilon_{t-i}\cdot\varepsilon_{t+k-j}) \\ &= \sigma^2\sum_{i=0}^{\infty}\psi_i\psi_{i+k} = \gamma_{-k} \qquad (k = 0,1,2,\cdots),\end{aligned} \tag{3-3}$$

相应的自相关函数 ρ_k 为

$$\rho_k = \frac{\gamma_k}{\gamma_0} = \frac{\sum_{i=0}^{\infty}\psi_i\psi_{i+k}}{\sum_{i=0}^{\infty}\psi_i^2} \qquad (k = 0,1,2,\cdots). \tag{3-4}$$

根据复变函数理论可知,式(3-4)中的 ψ_j 和 ρ_k 全体是相互一一对应的.换言之,由 ψ_j 全体可唯一决定 ρ_j,反之亦然.这一点是很重要的,它说明线性序列的自相关函数唯一地确定了其滑动加权的系数,再联合 ε_t 的分布则决定了序列的全部结构特征.尽管这种结构在实际使用时并不总被关注,但是,由于 ε_t 的分布和 ρ_k 都是可以被估计的,从而线性序列的结构总是完全可以被估计的.对一般平稳序列而言,这一点不是总可以做到的.

另一方面,利用式(2-6)还可以建立起式(3-1)中诸系数 ψ_j 与 x_t 的谱密度的联系,即

$$\begin{aligned}f(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\gamma_k\exp(-\mathrm{i}k\omega) \\ &= \frac{\sigma^2}{2\pi}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\sum_{j=0}^{\infty}\psi_j\psi_{j+|k|}\exp(-\mathrm{i}k\omega) \\ &= \frac{\sigma^2}{2\pi}\left|\sum_{j=0}^{\infty}\psi_j\exp(-\mathrm{i}j\omega)\right|^2.\end{aligned} \tag{3-5}$$

在此顺便指出,满足式(3-1)的线性序列具有式(3-5)的谱密度,反之不一定总成立.也就是说,存在着其他具有式(3-5)谱密度的平稳序列,不是满足式(3-1)的线性序列.

3.1.2 ARMA 序列与模型

尽管线性平稳序列只是平稳序列的子类,但是,如果式(3-1)中的全部系数都是自由取值的参数,其个数是无穷多的.这在实际中是无法估计的,也是无法操作的.因此,具有实际使用价值的线性序列,其相应的系数是被有限个未知参数决定的,亦称为依赖有限参数的线性序列.以下先举一个最简单的例子.例如,

$$x_t = \sum_{j=0}^{\infty}\alpha^j\varepsilon_{t-j} \qquad (|\alpha| < 1), \tag{3-6}$$

显然,上式中右边的级数是收敛的,而且,

$$\psi_j = \alpha^j \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

这些 ψ_j 只依赖于一个未知参数 α.

经过简单的验算便可知,上述的 x_t 满足以下的递推关系式:

$$x_t - \alpha x_{t-1} = \sum_{j=0}^{\infty}\alpha^j\varepsilon_{t-j} - \sum_{j=0}^{\infty}\alpha^{j+1}\varepsilon_{t-j-1} = \varepsilon_t,$$

或者写成

$$x_t = \alpha x_{t-1} + \varepsilon_t.$$

这一关系式被称为一阶自回归模型,简记为 AR(1) 模型.

再由式(3-5),得

$$f(\omega) = \frac{\sigma^2}{2\pi}\left|\sum_{j=0}^{\infty}\alpha^j\exp(-\mathrm{i}j\omega)\right|^2 = \frac{\sigma^2}{2\pi\,|\,1-\alpha\exp(-\mathrm{i}\omega)\,|^2}.$$

以上的叙述不仅简单明了,而且容易被推广到更高阶的自回归模型.

1. AR 模型

AR 模型为

$$x_t = \alpha_1 x_{t-1} + \cdots + \alpha_p x_{t-p} + \varepsilon_t, \tag{3-7}$$

其中 ε_t 为白噪声,而且 ε_t 与 $x_{t-k}(k \geq 1)$ 独立;$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_p)^{\mathrm{T}}$ 为自回归系数;p 为自回归阶数. 为了保证存在平稳序列满足式(3-7),还需要类似于式(3-6)中 $|\alpha| < 1$ 的条件,即如下的平稳性条件:

$$1 - \alpha_1 u - \alpha_2 u^2 - \cdots - \alpha_p u^p \neq 0 \qquad (对于任何\ |u| \leq 1). \tag{3-8}$$

2. MA 模型

MA 模型为

$$x_t = \varepsilon_t - \beta_1\varepsilon_{t-1} - \beta_2\varepsilon_{t-2} - \cdots - \beta_q\varepsilon_{t-q}, \tag{3-9}$$

其中 ε_t 为白噪声;$\boldsymbol{\beta} = (\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_q)^{\mathrm{T}}$ 为滑动平均系数;q 为阶数. 无论 β_j 是怎样的值,式(3-9)中的 x_t 总是平稳线性序列. 但是,为了使式(3-9)中的 β_j 与序列的自相关函数相互一一对应,也为了 ε_t 能表达成 x_t 的滑动和,需要附加一个与式(3-8)相似的条件,并称之为可逆性条件. 即

$$1 - \beta_1 u - \beta_2 u^2 - \cdots - \beta_q u^q \neq 0 \qquad (对一切\ |u| \leq 1). \tag{3-10}$$

3. ARMA 模型

ARMA 模型为

$$x_t = \alpha_1 x_{t-1} + \cdots + \alpha_p x_{t-p} + \varepsilon_t - \beta_1\varepsilon_{t-1} - \cdots - \beta_q\varepsilon_{t-q}, \tag{3-11}$$

其中 ε_t 为白噪声,ε_t 与 $x_{t-k}(k \geq 1)$ 独立;$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_p$ 为自回归系数;p 为自回归阶数;$\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_q$ 为滑动平均系数;q 为滑动平均阶数;平稳性条件式(3-8)和可逆性条件式(3-10)同时成立.

记 B 为后移算子,即 $\mathrm{B}x_t = x_{t-1}$,$\mathrm{B}\varepsilon_t = \varepsilon_{t-1}$,$\mathrm{B}^2x_t = x_{t-2}$ 等等. 再记

$$\varphi(u) = 1 - \alpha_1 u - \cdots - \alpha_p u^p,$$

$$\theta(u) = 1 - \beta_1 u - \cdots - \beta_q u^q,$$

于是,式(3-11)可以缩写成

$$\varphi(\mathrm{B})x_t = \theta(\mathrm{B})\varepsilon_t. \tag{3-12}$$

借助上式可得到式(3-12) 的传递形式:

$$x_t = \varphi^{-1}(\mathrm{B})\theta(\mathrm{B})\varepsilon_t = \psi(\mathrm{B})\varepsilon_t = \sum_{j=0}^{\infty}\psi_j\varepsilon_{t-j}, \tag{3-13}$$

其中

$$\psi(\mathrm{B}) = \sum_{j=0}^{\infty}\psi_j\mathrm{B}^j,$$

ψ_j 诸系数由以下恒等式确定

$$\varphi(\mathrm{B})\psi(\mathrm{B}) \equiv \theta(\mathrm{B}).$$

另一形式是逆转形式,即

$$\varepsilon_t = \theta^{-1}(\mathrm{B})\varphi(\mathrm{B})x_t = \pi(\mathrm{B})x_t = \sum_{j=0}^{\infty}\pi_j x_{t-j}, \tag{3-14}$$

其中

$$\pi(\mathrm{B}) = \sum_{j=0}^{\infty}\pi_j\mathrm{B}^j,$$

π_j 诸系数由以下恒等式确定

$$\varphi(\mathrm{B}) = \theta(\mathrm{B})\pi(\mathrm{B}).$$

仿照讨论式(3-6) 中 x_t 的谱密度表达式方法,再利用式(3-12) 中的缩写符号,可以导出满足式(3-11) 的 x_t 的谱密度为

$$f(\omega) = \frac{\sigma^2}{2\pi}\frac{|\theta(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega})|^2}{|\varphi(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega})|^2}, \tag{3-15}$$

上式中的谱密度函数被称为**有理谱密度函数**. 容易看出,有理谱密度函数能够很好地逼近连续谱密度函数. 由此可见,ARMA 模型的解能够很好地逼近线性序列. 由于 ARMA 模型在许多领域中有实际背景,所以,ARMA 模型具有广泛的应用价值,而且也被研究得较深入.

在研究 ARMA 模型的估计时,还将要用到 ARMA 序列的自协方差函数的性质,为此下面将介绍 ARMA 序列的自协方差函数的最主要的性质.

首先,考虑 AR 模型式(3-7). 在式(3-7) 两边同乘以 x_{t-k},然后再同求期望值,可得

$$\gamma_k = \alpha_1\gamma_{k-1} + \alpha_2\gamma_{k-2} + \cdots + \alpha_p\gamma_{k-p} \qquad (k \geqslant 1), \tag{3-16}$$

上式被称为尤尔 - 沃克(Yule-Walker) 方程.

其次,考虑式(3-9)MA 模型. 经过直接验证,可得

$$\gamma_k = \begin{cases}\sigma^2(1 + \beta_1^2 + \cdots + \beta_q^2) & (k = 0), \\ \sigma^2(-\beta_k + \beta_{k-1}\beta_1 + \cdots + \beta_q\beta_{k-q}) & (1 \leqslant k \leqslant q), \\ 0 & (k > q).\end{cases} \tag{3-17}$$

最后,考虑式(3-11)ARMA 模型. 使用以上类似的推理方法,可得

$$\gamma_{q+j} = \alpha_1\gamma_{q+j-1} + \alpha_2\gamma_{q+j-2} + \cdots + \alpha_p\gamma_{q+j-p} \qquad (j \geqslant 1). \tag{3-18}$$

记 $y_t = x_t - \alpha_1 x_{t-1} - \cdots - \alpha_p x_{t-p}$,则它是满足式(3-9) 的 MA 序列,其自协方差函数

满足式(3-17).

以上这些公式建立了 ARMA 模型的自协方差函数值与相应模型参数的联系.

3.1.3 ARMA 序列的预报

时间序列的预报方法是时间序列分析的重要内容.所谓**时间序列预报**,就是根据序列的现在和历史值,对未来时刻的取值进行估计.在讨论 ARMA 序列的预报方法之前,先介绍两种预报准则.

记 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 为平稳序列的样本.先讨论对 x_{n+1} 的估计,亦称为一步预报.其预报准则有以下两种.

其一,**线性最小方差预报**准则.即选择满足以下两条件的估计 $\hat{x}_{n+1}$:

$$\hat{x}_{n+1} = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n,$$

且

$$E(x_{n+1} - \hat{x}_{n+1})^2 = \inf_{a_1,\cdots,a_n} E(x_{n+1} - a_1x_1 - a_2x_2 - \cdots - a_nx_n)^2.$$

其二,**最小方差预报**准则.即选择函数 φ,使

$$E(x_{n+1} - \psi(x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1))^2 = \inf_{\varphi} E(x_{n+1} - \varphi(x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1))^2.$$

记 $\{x_t\}$ 为平稳序列.由于 $Ex_t = 0, \gamma_k = Ex_tx_{t+k}$ 为其自协方差值.根据概率和矩阵推演,不难给出满足线性最小方差预报准则的一步预报值:

$$\hat{x}_{n+1} = [\boldsymbol{\Gamma}_n^{-1}\boldsymbol{b}_n]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_n, \tag{3-19}$$

其中

$$\boldsymbol{X}_n = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}};$$

$$\boldsymbol{b}_n = (\gamma_1, \gamma_2, \cdots, \gamma_n)^{\mathrm{T}};$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_n = \begin{bmatrix} \gamma_0 & \gamma_1 & \cdots & \gamma_{n-1} \\ \gamma_1 & \gamma_0 & \cdots & \gamma_{n-2} \\ \cdots & \cdots & & \cdots \\ \gamma_{n-1} & \gamma_{n-2} & \cdots & \gamma_0 \end{bmatrix}.$$

利用条件期望的定义和性质不难验证,满足最小方差准则的一步预报就是如下的条件期望值:

$$\hat{x}_{n+1} = E(x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1). \tag{3-20}$$

容易看出,要计算式(3-19)的线性最小方差预报,只要利用序列的自协方差函数值就可实现;而计算式(3-20)的条件期望值,则必须知道 $x_1, x_2, \cdots, x_{n+1}$ 的联合分布,这比知道 $x_1, x_2, \cdots, x_{n+1}$ 的自协方差值要复杂得多.

以上两种预报方法,对一般平稳序列均适用.但是,两种预报结果不一定相同.对于线性序列式(3-1)而言,两种预报方法是一致的;反之不一定成立.事实上,在第4章中将看到,对于某些非线性序列的一步预报,以上两种方法就不一定相同.

现在讨论 ARMA 序列的预报问题.由于 ARMA 序列是线性序列,而对线性序列来说,以上两种预报方法是一致的,所以,这里只讨论条件期望的预报方法.

(1)AR 序列的预报. 利用式(3-7) 和条件期望的性质, 易见

$$\begin{aligned}\hat{x}_{n+1} &= E(x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1) \\ &= E(\alpha_1 x_n + \alpha_2 x_{n-1} + \cdots + \alpha_p x_{n-p+1} \mid x_n, \cdots, x_{n-p+1}) \\ &= \alpha_1 x_n + \alpha_2 x_{n-1} + \cdots + \alpha_p x_{n-p+1}.\end{aligned}$$

依类似的方法可得, k 步预报 $\hat{x}_{n+k}$ 满足

$$\begin{aligned}\hat{x}_{n+k} &= E(x_{n+k} \mid x_n, x_{n+1}, \cdots, x_1) \\ &= \alpha_1 \hat{x}_{n+k-1} + \alpha_2 \hat{x}_{n+k-2} + \cdots + \alpha_p \hat{x}_{n+k-p}.\end{aligned} \tag{3-21}$$

上式说明 $\{x_t\}$ 的多步预报可以用迭代形式计算, 而且其初始值 $\hat{x}_n = x_n, \hat{x}_{n-1} = x_{n-1}, \cdots$ 多步预报的计算十分方便是 AR 模型的主要优点之一.

(2)MA 序列的预报. 利用式(3-9) 可知,

$$\begin{aligned}\hat{x}_{n+1} &= E(x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1) \\ &= E(\varepsilon_{n+1} - \beta_1 \varepsilon_n - \cdots - \beta_q \varepsilon_{n-q+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1) \\ &= -\beta_1 E(\varepsilon_n \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1) - \beta_2 E(\varepsilon_{n-1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1) - \cdots - \\ &\quad \beta_q E(\varepsilon_{n-q+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1).\end{aligned} \tag{3-22}$$

利用式(3-14), 可知

$$E(\varepsilon_{n-j} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots) = \varepsilon_{n-j} = \sum_{i=0}^{\infty} \pi_i x_{n-j-i},$$

但是, 在式(3-22) 的条件期望值中, 其条件为 $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1$, 而上式的条件是 $x_n, x_{n-1}, \cdots$ 即全部历史值为已知条件. 利用式(3-10) 的条件可知, 上式中的系数 π_i 以指数速度趋于零, 从而有以下的近似公式:

$$\hat{x}_{n+1} \approx -\beta_1 \sum_{j=0}^{n-1} \pi_j x_{n-j} - \beta_2 \sum_{j=0}^{n-2} \pi_j x_{n-j-1} - \cdots - \beta_q \sum_{j=0}^{n-q} \pi_j x_{n-j-q+1}.$$

对于 MA 序列的多步预报, 也可按上述方法近似求得, 这里从略. 需要特别指出的是,

$$\hat{x}_{n+k} = 0 \qquad (k > q). \tag{3-23}$$

(3)ARMA 序列的预报. 利用式(3-14) 以及上述的 MA 序列近似预报方法, 可以近似估计 $\varepsilon_n, \varepsilon_{n-1}, \cdots$ 各值, 从而可以给出 x_{n+k} 估计值, 细节从略.

这里还要顺便指出, 在给出预报后, 还应给出预报误差的方差值. 对于 AR 模型来说, 一步预报误差的方差就是 ε_{n+1} 的方差, 因为

$$(x_{n+1} - \hat{x}_{n+1}) = \varepsilon_{n+1}.$$

对一般 ARMA 模型而言, 其 k 步预报的误差方差满足

$$E(x_{n+k} - \hat{x}_{n+k})^2 \leqslant E(x_{n+k+1} - \hat{x}_{n+k+1})^2 \qquad (k \geqslant 0),$$

$$E(x_{n+k} - \hat{x}_{n+k})^2 \approx \sigma^2(1 + \psi_1^2 + \cdots + \psi_{k-1}^2) \qquad (k \geqslant 1),$$

其中 ψ_j 为式(3-13) 中的系数.

3.2 ARMA 模型估计

3.2.1 AR 模型估计

所谓 AR 模型的估计，就是根据数据序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，建立 AR 模型，也称为 AR 模型拟合，其中包括对模型参数和阶数的估计. 下面先讨论阶数已知时的参数估计问题. 关于阶数估计问题将放在最后讨论.

1. 尤尔 - 沃克估计

将尤尔 - 沃克方程式(3-16)中的 γ_k 诸值用相应的样本值代替，并取 $k = 1, 2, \cdots, p$，则得到 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_p)^{\mathrm{T}}$ 的**尤尔 - 沃克**估计：

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}} = \widehat{\boldsymbol{\Gamma}}^{-1}\widehat{\boldsymbol{b}}, \tag{3-24}$$

其中

$$\widehat{\boldsymbol{b}} = (\widehat{\gamma}_1, \widehat{\gamma}_2, \cdots, \widehat{\gamma}_p)^{\mathrm{T}};$$

$$\widehat{\boldsymbol{\Gamma}} = \begin{bmatrix} \widehat{\gamma}_0 & \widehat{\gamma}_1 & \cdots & \widehat{\gamma}_{p-1} \\ \widehat{\gamma}_1 & \widehat{\gamma}_0 & \cdots & \widehat{\gamma}_{p-2} \\ \cdots & \cdots & & \cdots \\ \widehat{\gamma}_{p-1} & \widehat{\gamma}_{p-2} & \cdots & \widehat{\gamma}_0 \end{bmatrix}.$$

由于这一方法只用到了序列的样本二阶矩之值，所以也称为矩估计方法.

2. 最小二乘估计

由于式(3-7)与线性回归模型十分相似，所以可用最小二乘法来估计自回归系数，即求解如下极小值问题：

$$\inf_{\alpha_1, \cdots, \alpha_p} \sum_{t=p+1}^{n} (x_t - \alpha_1 x_{t-1} - \cdots - \alpha_p x_{t-p})^2.$$

当样本长度 n 较大时，不难看出，以上两种估计是近似相等的，这里略去细节.

3. 极大似然估计

如果在模型式(3-7)中假定 ε_t 为正态白噪声序列，样本 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的对数似然函数为

$$l(\boldsymbol{\alpha}, \sigma^2 \mid x_1, x_2, \cdots, x_n) = -\frac{n}{2}\log 2\pi - \frac{1}{2}\log \mid \boldsymbol{\Gamma}_n \mid - \frac{1}{2}\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Gamma}_n^{-1}\boldsymbol{X}_n, \tag{3-25}$$

其中 $\boldsymbol{\Gamma}_n$ 与 $\boldsymbol{X}_n$ 的定义与式(3-19)相同，$\mid \boldsymbol{\Gamma}_n \mid$ 表示矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}_n$ 的行列式. 根据式(3-16)知，$\boldsymbol{\Gamma}_n$ 的元素 γ_{i-j} 都是未知参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 σ^2 的函数，但是关系比较复杂，难于写出简单的明显表达式，所以，严格求解式(3-25)的极大值是十分困难的，即难以求出精确的极大似然估计. 在样本长度 n 较大时，可以建立式(3-25)的近似求解方法，而且，也与 1. 和 2. 中的估计相近似. 由于方法的叙述较复杂，这里从略，可参见文献[4].

4. 残差方差估计

当 AR 模型式(3-7)中的参数被估计出来后，还要对残差项 ε_t 的方差 σ^2 进行估

计. 记 $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 的估计，于是拟合 AR 模型后的残差序列为

$$\hat{\varepsilon}_k = x_k - \hat{\alpha}_1 x_{k-1} - \cdots - \hat{\alpha}_p x_{k-p} \qquad (k = p+1, p+2, \cdots, n), \quad (3\text{-}26)$$

残差方差 σ^2 的估计为

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-p}\sum_{k=p+1}^{n}\hat{\varepsilon}_k^2. \qquad (3\text{-}27)$$

特别是，当 $\hat{\alpha}$ 为尤尔 - 沃克估计时，$\hat{\sigma}^2$ 有如下表达式：

$$\hat{\sigma}^2 = \hat{\gamma}_0 - \hat{\boldsymbol{\alpha}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{b}} = \hat{\gamma}_0 - \hat{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{\Gamma}}^{-1}\hat{\boldsymbol{b}}, \qquad (3\text{-}28)$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\Gamma}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 见式(3-24) 中的定义.

3.2.2　MA 模型估计

1. 矩估计

在式(3-17) 中以 $\hat{\gamma}_k$ 代替 γ_k，并考虑 $k = 0, 1, \cdots, q$ 等 $q+1$ 个方程式，寻找此方程式之解作为 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 的估计，称为**矩估计**. 当存在多组解时，应选择满足式(3-10) 的 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 作为 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计. 由于计算方法复杂，在实际应用中，只有在 q 不太大时，比如 $q \leqslant 4$ 时，才能求出 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 的矩估计.

2. 极大似然估计

在 MA 模型式(3-9) 中，当 ε_t 被假定为白噪声时，样本 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的对数似然函数为

$$l(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mid x_1, x_2, \cdots, x_n) = -\frac{n}{2}\log 2\pi - \frac{1}{2}\log|\boldsymbol{\Gamma}_n| - \frac{1}{2}\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Gamma}_n^{-1}\boldsymbol{X}_n.$$

上式表面上与式(3-25) 相同，但是，式中的 $\boldsymbol{\Gamma}_n$ 的诸元素 γ_{i-j} 是按照式(3-17) 与未知参数 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 相联系的. 同样因为没有简单的明显的联系表达式，无法求解严格极大似然估计，只能求解近似估计. 其方法可用一般数值求解方法，详见文献[4].

3. 自回归逼近方法

根据 ARMA 模型的逆转形式式(3-14) 可知，MA 模型亦可视为无穷阶的 AR 模型. 再依可逆性条件式(3-10) 知，逆转形式式(3-14) 中的系数 π_j 以指数速度趋于零. 这表明 q 阶的 MA 模型可以用适当高阶 AR 模型近似描述. 当 q 已知时，可根据数据序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 拟合 P 阶 AR 模型，其方法可用尤尔 - 沃克估计，其中 P 比 q 大得多，但应当比 n 小得多. 记此拟合的残差序列为 $\hat{\varepsilon}_k$, $k = P+1, P+2, \cdots, n$，这可用类似于式(3-26) 方法计算，只须将式(3-26) 中的 p 用这里的 P 代替. 然后，根据 MA 模型式(3-9) 写出如下的近似模型：

$$x_t = -\beta_1\hat{\varepsilon}_{t-1} - \beta_2\hat{\varepsilon}_{t-2} - \cdots - \beta_q\hat{\varepsilon}_{t-q} + \varepsilon_t \qquad (t = P+1, P+2, \cdots, n). \quad (3\text{-}29)$$

注意，上式中 x_t 和 $\hat{\varepsilon}_{t-j}(1 \leqslant j \leqslant q)$ 都有记录值或计算值，ε_t 仍表示不可测量的白噪

声.可见,上式是典型的线性回归模型,x_t 为应变元,$\widehat{\varepsilon}_{t-j}(1 \leqslant j \leqslant \delta)$ 为自变元,ε_t 为残差.利用熟知的回归分析方法,比如用最熟知的最小二乘方法,可以容易地给出 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 的估计,这里从略.这种自回归逼近的方法,其计算方法简便,具有较好的实用性.

3.2.3 ARMA模型估计

1.矩估计

将式(3-18)中的 γ_k 值以其样本值 $\widehat{\gamma}_k$ 代替,并取 $j = 1,2,\cdots,p$,于是得到如下的线性代数方程:

$$\alpha_1\widehat{\gamma}_q + \alpha_2\widehat{\gamma}_{q-1} + \cdots + \alpha_p\widehat{\gamma}_{q-p+1} = \widehat{\gamma}_{q+1},$$
$$\alpha_1\widehat{\gamma}_{q+1} + \alpha_2\widehat{\gamma}_q + \cdots + \alpha_p\widehat{\gamma}_{q-p+2} = \widehat{\gamma}_{q+2},$$
$$\cdots$$
$$\alpha_1\widehat{\gamma}_{q+p-1} + \alpha_2\widehat{\gamma}_{q+p-2} + \cdots + \alpha_p\widehat{\gamma}_q = \widehat{\gamma}_{q+p}.$$

注意在上式中 $\widehat{\gamma}_k = \widehat{\gamma}_{-k}, k \geqslant 0$.求出以上方差的解 $\widehat{\boldsymbol{\alpha}} = (\widehat{\alpha}_1,\widehat{\alpha}_2,\cdots,\widehat{\alpha}_p)^{\mathrm{T}}$,即为 $\boldsymbol{\alpha}$ 的矩估计.

在获得估计 $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}$ 后,计算 $\widehat{y}_t$,

$$\widehat{y}_t = x_t - \widehat{\alpha}_1x_{t-1} - \widehat{\alpha}_2x_{t-2} - \cdots - \widehat{\alpha}_px_{t-p} \qquad (t = p+1,p+2,\cdots,n).$$

可近似视 $\widehat{y}_t$ 为MA序列,其阶数为 q.于是,用前一节的方法可以给出 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 的估计.

2.自回归逼近方法

其原理与MA模型的自回归逼近方法相似,其具体方法也相似,只是式(3-29)应被下式代替:

$$x_t = \alpha_1x_{t-1} + \cdots + \alpha_px_{t-p} - \beta_1\widehat{\varepsilon}_{t-1} - \cdots - \beta_q\widehat{\varepsilon}_{t-q} + \varepsilon_t \qquad (t = s+1,\cdots,n). \tag{3-30}$$

上式是对式(3-11)的近似描述,其中 $s = \max(p,q)$.视上式中的 x_t 为应变元,$x_{t-1},\cdots,x_{t-p},\widehat{\varepsilon}_{t-1},\cdots,\widehat{\varepsilon}_{t-q}$ 为自变元,则上式是典型的线性回归模型.于是,式(3-30)中的未知参数 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 都可用回归分析方法给出估计.这种自回归逼近方法便于计算.

3.残差方差的估计

ARMA模型中 ε_t 的方差估计已包含在上述的估计方法中,这里再补充一种估计方法.在获得ARMA模型参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计 $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}$ 和 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ 以后,可用式(3-11)的迭代方法给出拟合残差序列 $\widehat{\varepsilon}_t$,

$$\widehat{\varepsilon}_t = \widehat{\beta}_1\widehat{\varepsilon}_{t-1} + \cdots + \widehat{\beta}_q\widehat{\varepsilon}_{t-q} + x_t - \widehat{\alpha}_1x_{t-1} - \cdots - \widehat{\alpha}_px_{t-p} \qquad (t = p+1,\cdots,n),$$

其中 $x_t(1 \leqslant t \leqslant n)$ 是数据序列，迭代的初始值 $\widehat{\varepsilon}_p, \widehat{\varepsilon}_{p-1}, \cdots$ 等可以用零近似之. 有了 $\widehat{\varepsilon}_t$ 后便可用式(3-27) 计算 σ^2 的估计 $\widehat{\sigma}^2$.

3.2.4　ARMA 模型的阶数估计

当 ARMA 模型的阶数 p 和 q 未知时，需要根据数据序列进行估计，文献中提出过不少估计阶数的方法，这里只介绍一种应用较普遍的定阶准则，即 **AIC** (akaike information criterion) 准则. 用此准则确定未知阶数称为 AIC 估计，其方法亦称 AIC 方法. 现将此方法描述如下.

仍以 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 表示样本序列. 在 ARMA 模型的阶数未知时，仍以 p 和 q 表示之，它们是待定的非负整数. 对于任意一对 p, q 的给定值，按前面介绍的方法，给出相应于 p 和 q 阶 ARMA 模型的参数估计，并给出拟合残差方程的估计，记为 $\widehat{\sigma}^2(p, q)$，这里的 p 和 q 将取各种不同的可能值. 于是，AIC 准则被定义为

$$\mathrm{AIC}(p, q) = \log\widehat{\sigma}^2(p, q) + \frac{2(p+q)}{n} \qquad (0 \leqslant p, q \leqslant k), \qquad (3\text{-}31)$$

其中正整数 k 是预先指定的，最好是真阶数的某个已知上界. 在无法给出这样的上界时，亦可用 K_n 代替，K_n 是与 $\log n$ 同阶增加的正整数. $\widehat{p}$ 和 $\widehat{q}$ 被称为 AIC 估计，如果它们是式(3-31) 中 $\mathrm{AIC}(p, q)$ 的最小值解，即

$$\mathrm{AIC}(\widehat{p}, \widehat{q}) = \min_{0 \leqslant p, q \leqslant k} \mathrm{AIC}(p, q). \qquad (3\text{-}32)$$

以上方法最早是针对 AR 模型定阶问题提出的，后来被推广到 ARMA 模型阶数估计中. 在理论上，当样本个数 n 无限增加时，有人证明，用 AIC 准则方法给出的阶数估计 $\widehat{p}$ 和 $\widehat{q}$ 比真值小的概率是零，但是，比真值大的概率是正的. 这就说明，AIC 估计方法是不相容的，而且说明，其估计偏大的概率是正的，但是偏小的概率是零. 在这种理论结果的影响下，又出现了 **BIC** (bayesian information criterion) **准则**，即将上述的 $\mathrm{AIC}(p, q)$ 函数用以下 $\mathrm{BIC}(p, q)$ 代替：

$$\mathrm{BIC}(p, q) = \log\widehat{\sigma}^2(p, q) + \frac{(p+q)\log n}{n} \qquad (0 \leqslant p, q \leqslant k), \quad (3\text{-}33)$$

其他步骤不变，仍选择使上述 $\mathrm{BIC}(p, q)$ 取极小值的 $\widehat{p}$ 和 $\widehat{q}$ 作为 p 和 q 的估计，并称之为 BIC 估计. 在理论上已被证明，当样本序列的确满足某个 ARMA 模型时，BIC 估计 $\widehat{p}$ 和 $\widehat{q}$ 将随 n 增加而趋于各自真阶数，即 BIC 方法是相容的. 尽管如此，由于客观实际中的序列很难说是真正的 ARMA 序列，进行 ARMA 模型拟合的实质只是一种近似描述，所以，AIC 准则方法虽有对阶数高估的特征，但仍被广泛使用，特别是以预报为目的的时候尤其如此. 只有当使用者们对模型结构更重视时，才对 BIC 方法更有兴趣.

3.3　非平稳 ARMA 序列与模型

在一般情况下，**非平稳序列**可能是非常复杂的，难以进行任何统计分析．目前，已被研究并被应用于实际的非平稳序列，大致可分为两大类．

第一类指均值函数为非平稳的，随机项是平稳的．确切地说，此类非平稳序列可表成如下形式：

$$y_t = m_t + x_t, \tag{3-34}$$

其中 x_t 为平稳序列，m_t 为非随机函数．一般还假定 $Ex_t = 0$，于是 $Ey_t = m_t$，m_t 不一定恒为常值．特别地，当 x_t 为白噪声时，式(3-34) 是典型的非线性回归模型．当 x_t 是平稳序列时，而且需要对它建立 ARMA 模型时，这就属于时间序列分析的内容．

如果已有数据序列 $y_1, y_2, \cdots, y_n$，则既要根据它们估计式(3-34) 中的 m_t，又要估计 x_t 的 ARMA 模型，这可分两步完成．

第一步，使用回归分析方法，对 m_t 进行估计，记其为 $\widehat{m}_t$；然后计算拟合残差序列 $\widehat{x}_t$，

$$\widehat{x}_t = y_t - \widehat{m}_t \qquad (t = 1, 2, \cdots, n).$$

第二步，将 $\widehat{x}_1, \widehat{x}_2, \cdots, \widehat{x}_n$ 当作序列 $\{x_t\}$ 的样本，按照 ARMA模型的估计方法，拟合 ARMA 模型．

以上方法是一种常用的方法．在附加正态 ARMA 模型的假定下，也可以使用极大似然原理，对式(3-34) 的 m_t 和 ARMA 模型进行更精细的估计．但是，由于方法过于繁琐，除非在 m_t 的形式简单，$q = 0$，且 p 值不大的情况下，这种精细的估计方法难以计算．

另一类非平稳序列是指如下将要介绍的求和序列和季节序列．

3.3.1　求和序列

若 $\{x_t\}$ 为平稳 ARMA 序列，则称

$$y_t = \sum_{s=1}^{t} x_s$$

为**求和序列**．仍用 B 表示延迟算子，则有

$$(1 - \mathrm{B}) y_t = y_t - y_{t-1} = x_t.$$

在形式上将上式与式(3-12) 联系，可得

$$(1 - \mathrm{B}) \varphi(\mathrm{B}) y_t = \varphi(\mathrm{B}) x_t = \theta(\mathrm{B}) \varepsilon_t. \tag{3-35}$$

若令 $\Phi(\mathrm{B}) = (1 - \mathrm{B}) \varphi(\mathrm{B})$，则上式又可写成：

$$\Phi(\mathrm{B}) y_t = \theta(\mathrm{B}) \varepsilon_t. \tag{3-36}$$

上式在形式上与 ARMA 模型式(3-12) 相似，但是 $\Phi(\mathrm{B})$ 不再满足式(3-8) 的平稳性条件．

关于求和序列 $\{y_n\}$ 的预报方法，与 ARMA 序列并无实质上的区别，因为 $y_{n+1} =$

$y_n + x_{n+1}$ 在给定 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 时，也就给定了 $x_2, x_3, \cdots, x_n$，其中 $x_k = y_k - y_{k-1}$. 而在给定 $x_2, x_3, \cdots, x_n$ 时，预报 x_{n+1} 的方法在前面已经介绍了，于是关于 y_{n+1} 的预报为

$$\hat{y}_{n+1} = y_n + \hat{x}_{n+1},$$

其中
$$\hat{x}_{n+1} = E(x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1).$$

关于求和模型式(3-35)的估计方法，也是借助于 ARMA 模型拟合来完成的. 若已知样本序列 $y_1, y_2, \cdots, y_n$，利用 y_t 与 x_t 的关系可得 $x_t = y_t - y_{t-1}$，从而可得 $\{x_t\}$ 的样本序列 $x_2, x_3, \cdots, x_n$. 再用这些数据序列值，以及前面介绍的 ARMA 模型拟合方法，便可获得模型式(3-35)中 $\varphi(B)$ 和 $\theta(B)$ 的估计.

在对求和序列进行统计分析时，比较重要的问题是判断 y_t 是否为求和序列. 文献中有一些解决此类问题的方法，这里介绍两种.

第一种是直观分析的方法. 所谓直观分析，是指观察样本序列 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 和差分序列 $y_2 - y_1, y_3 - y_2, \cdots, y_n - y_{n-1}$ 的变化趋势. 可将这两个序列绘于坐标上，以时刻 t 为横坐标，y_t 和 $(y_t - y_{t-1})$ 为纵坐标，观察这两个序列随时间不同而变化的走势. 当 y_t 有明显增长(或下降)趋势，而 $(y_t - y_{t-1})$ 近似于平稳变化时，可认为 y_t 是求和序列. 也可观察 y_t 的样本自相关函数 $\hat{\rho}_k$ 的变化趋势，若当 k 增加时，$\hat{\rho}_k$ 缓慢下降，而且当 k 靠近 1 时，$\rho_k \approx 1$，则可判断 y_t 为求和序列.

另一种方法是近似的假设检验方法. 仍以 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 表示样本序列，利用前几小节介绍的方法，对此序列拟合 ARMA 模型，并求出相应的残差序列 $\hat{\varepsilon}_k$. 计算 $\hat{\varepsilon}_k$ 的样本自相关函数 $\hat{\rho}_k(\varepsilon)$(见式(1-3)). 再利用式(1-7)则可得到判断 $\{y_t\}$ 是否为平稳 ARMA 序列的检验方法，这里细节从略.

以上介绍的是一阶求和序列，类似地还可推广到 d 阶求和序列. 所谓 d 阶求和序列，是指 y_t 为某个平稳 ARMA 序列的 d 重求和，亦可说，对 y_t 的 d 次差分后为 ARMA 序列. 换言之，在式(3-36)中的

$$\Phi(B) = (1 - B)^d \varphi(B),$$

其中 d 是正整数，为求和阶数；$\varphi(B)$ 为满足平稳性条件的自回归系数多项式.

关于 d 阶求和序列的预报方法，比较容易理解和计算. 但是，关于 d 阶求和模型的估计，则增加了对未知阶数的 d 估计内容. 由于一般使用的 d 值不会太大，一般只取 $d = 1$ 或 2，所以，这里不再介绍一般的 d 阶模型的估计方法.

3.3.2　季节性序列

在气象、经济等许多领域的月记录序列中，明显地呈现有 12 周期的变化规律. 对于这种带随机性的周期变化规律，有几种不同的描述方法. 这里只叙述季节 ARMA 模型的描述方法. 简言之，若对 $\{y_t\}$ 以 12 步差分，即 $x_t = y_t - y_{t-12}$ 为平稳 ARMA 序列，则称 y_t 为以 12 为周期的**季节性 ARMA 序列**. 此序列所满足的模型，亦可写成如式(3-36)的形式，或者更明确地写成类似于式(3-35)的分解形式，即

$$(1 - B^{12})\varphi(B)y_t = \theta(B)\varepsilon_t.$$

在上式中$(1-B^{12})$恰是表示相距12步的差分.

在某些领域中,比如旅游业,设其逐月的旅客人数记录序列为y_t,它既表现有周期规律,又有不断增长的趋势.对于这类序列用求和与季节联合模型描述更合适,即

$$(1-B)^d(1-B^{12})\varphi(B)y_t=\theta(B)\epsilon_t.$$

为了描述更复杂的周期性的增长规律,还可以引入比上述模型更复杂的模型,这里不一一列举.关于以上的季节模型的预报、估计方法,本质上都是借助于ARMA模型的预报与估计方法,与前面介绍的求和模型也很相似,这里从略.

3.3.3 季节周期相关序列

从理论角度看,上述季节序列不仅是非平稳序列,而且是发散型的不平稳序列.所谓发散型的非平稳序列,是指该序列的方差函数$\sigma_t^2=E(y_t-Ey_t)^2$为发散的,即σ_t^2无公共上界.回忆式(3-34)的y_t,由于m_t不为常数,虽然x_t为平稳序列,但$y_t=m_t+x_t$仍为非平稳序列,因此,由

$$\sigma_t^2=E(y_t-Ey_t)^2=Ex_t^2=\gamma_0$$

可知,$\{y_t\}$的方差函数为常数,当然有界.在实际应用中,许多呈现有季节性规律的时间序列y_t,既不是平稳序列,也不是发散型的,甚至Ey_t也是有界的.显然,用前一小节所述的季节模型描述这样的季节性非平稳序列,在原理上有明显的欠缺.为描述这种非发散的季节性序列,下面介绍季节周期相关序列.

时间序列$\{y_t\}$被称为**季节周期相关序列**,是指它满足以下条件:

1° $Ey_t=m_t=m_{t+T}$,

2° $\gamma_{t,s}=E(y_t-m_t)(y_s-m_s)=\gamma_{t+T,s+T}$,

其中T为周期长度,比如月记录数据序列中的$T=12$,这是最常用的周期.

依条件1°知,m_t被T个值唯一决定,即

$$m_{kT+j}=m_j \qquad (\text{对一切 } k=0,1,\cdots;j=1,2,\cdots,T).$$

记

$$x_t(j)=y_{tT+j} \qquad (t=0,1,\cdots;j=1,2,\cdots,T).$$

对于固定的j,根据条件1°和2°知,$\{x_t(j)\}$是一个平稳序列.若记

$$\begin{aligned}X_t&=(x_t(1),x_t(2),\cdots,x_t(T))^{\mathrm T}\\&=(y_{tT+1},y_{tT+2},\cdots,y_{tT+T})^{\mathrm T}\end{aligned}$$

为一矢量随机序列,其均值序列为

$$EX_t=(m_1,m_2,\cdots,m_T)^{\mathrm T},$$

其协方差序列为

$$E(X_t-EX_t)(X_{t+k}-EX_t)^{\mathrm T}=\Gamma_k,$$

其中

$$\Gamma_k=[\gamma_{i,j+k}]_{1\leqslant i\leqslant j\leqslant T}.$$

事实上,矢量序列X_t是一个**多元平稳序列**.关于多元平稳序列定义见本篇第5章.

在实际应用中,对于上述周期相关序列还要作进一步的模型假定,最常用的是

假定矢量序列 X_k 为多元 AR 序列. 这种序列的预报和估计容易计算,所以有广泛应用价值. 关于多元 AR 模型的估计,详见第 5 章.

4 非线性时间序列模型

非线性时间序列具有广阔的应用背景,但是,其理论研究和模型统计比线性情况困难得多,而且有较多的实质性区别. 非线性时间序列的研究,是近代时间序列分析发展中的重要课题,目前正处在不断完善的过程中. 本章侧重介绍近年来有关非线性时间序列分析研究中的重要进展情况.

4.1 非线性 AR 模型

4.1.1 非线性时间序列

顾名思义,非线性序列是由 $\{\varepsilon_t\}$ 的滑动非线性变换形成的序列. 一般地,它在形式上可写成

$$x_t = w(\varepsilon_t, \varepsilon_{t-1}, \cdots). \tag{4-1}$$

例如,

$$x_t = \varepsilon_{t-1}\varepsilon_{t-2} + \varepsilon_t, \tag{4-2}$$

$$x_t = \frac{\varepsilon_t}{1 + \alpha\varepsilon_{t-1}^2}, \tag{4-3}$$

等等. 注意,式(4-3) 又可写成

$$\begin{aligned} x_t &= \varepsilon_t(1 + \alpha\varepsilon_{t-1}^2)^{-1} \\ &= \varepsilon_t(1 - \alpha\varepsilon_{t-1}^2 + \alpha^2\varepsilon_{t-1}^4 - \cdots). \end{aligned} \tag{4-3'}$$

由此式的启发,容易理解文献中提出的沃尔泰拉(V. Volterra) 展开级数[8]:

$$x_t = \sum_{j=0}^{\infty}\alpha_j\varepsilon_{t-j} + \sum_{i,j=0}^{\infty}\alpha_{ij}\varepsilon_{t-i}\varepsilon_{t-j} + \sum_{i,j,k=0}^{\infty}\alpha_{ijk}\varepsilon_{t-i}\varepsilon_{t-j}\varepsilon_{t-k} + \cdots. \tag{4-4}$$

这是一类很广的**非线性时间序列**类型. 易见,式(4-3') 是式(4-4) 的特例. 又若式(4-4) 右边除第一个求和外,余者均为零,则它包括了所有线性序列. 再如,若式(4-4) 右边只有前两项求和,而且求和只有有限项,则此时该序列被称为**双线性序列**,式(4-2) 就是这样的序列.

在引入了线性序列与非线性序列的定义后,人们自然会提问,这两种序列是否包括了所有的平稳序列呢?回答是否定的. 具体地说,有两层含义.

一层含义是,的确有许多平稳序列既不是上述的线性序列,也不是非线性序列,甚至于它们根本就不是由白噪声序列变换产生的. 例如,

$$x_t = \xi\cos(t\lambda) + \eta\sin(t\lambda),$$

其中 λ 为常数;(ξ, η) 为二元正态变量,而且 ξ 与 η 相互独立. 容易验证,上述的 x_t

是一平稳序列，但是它与白噪声无关.

另一层含义是，即使平稳序列 x_t 与某个白噪声序列有关，或者说是由某个白噪声序列产生的平稳序列，但它也可能仍不属于前述的线性与非线性情况. 例如，

$$\psi(x_t, x_{t-1}, \cdots, x_{t-p}, \varepsilon_t) = 0,$$

其中 x_t 在适当条件下关于上式可能有平稳解，但是它不一定能表达成式(4-1) 或式(4-4) 的形式. 实际上，在式(4-1) 和式(4-4) 中，无形中用了一个重要的前提条件，即平稳序列 x_t 与产生的白噪声序列的关系有显式解. 这一前提假设并未被研究者给出普适性的论证.

综上所述，无论是式(3-1) 的线性序列，还是式(4-1) 的非线性序列，都是平稳序列中的重要特殊子类. 对它们的研究有很多便利之处，所以被研究和使用得更多一些.

4.1.2 非线性自回归模型

将式(3-7) 的线性自回归模型推广到非线性自回归模型，至少有以下两种不同形式：

$$x_t = \psi(x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p}, \varepsilon_t), \tag{4-5}$$

及

$$x_t = \psi(x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p}) + \varepsilon_t. \tag{4-6}$$

在以上两式中，ε_t 均为白噪声，而且 ε_t 与 $x_{t-k}(k \geqslant 1)$ 独立. 显然，式(4-6) 是式(4-5) 的特殊情况，它被称为**可加噪声模型**. 当然，还有比以上式(4-6) 非线性自回归模型更广，而又比式(4-5) 简单的模型，这将在第 6 章中介绍. 本节将主要讨论式(4-6) 的**非线性自回归模型**.

讨论自回归模型式(4-6) 有平稳解的条件. 前述式(3-7) 有平稳解的充分必要条件是式(3-8). 但是，目前尚未给出式(4-6) 有平稳解的充分必要条件. 近年来取得的较重要的研究成果是得出式(4-6) 有平稳解的充分条件为：存在 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_p$ 满足式(3-8) 的条件，而且，

$$\frac{|\psi(u_1, u_2, \cdots, u_p) - \alpha_1 u_1 - \alpha_2 u_2 - \cdots - \alpha_p u_p|^2}{u_1^2 + u_2^2 + \cdots + u_p^2} \to 0$$
$$(\text{当 } u_1^2 + u_2^2 + \cdots + u_p^2 \to \infty \text{ 时}), \tag{4-7}$$

此外，还要假定白噪声 ε_t 的分布有正密度.

满足式(4-6) 的平稳序列称为**非线性自回归序列**. 一般来说，满足式(4-6) 的解不一定有形如式(4-1) 的明显表达式.

需要指出，满足上述充分条件时，式(4-6) 的平稳解还有两个重要性质：当 $E|\varepsilon_t|^r < \infty$ 时$(r \geqslant 1)$，必有 $E|x_t|^r < \infty$，即平稳解有 r 阶矩；此平稳解还具有遍历性. 这后一性质可以保证许多统计量的相容性. 例如，

$$\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n} x_t \to Ex_t \qquad (\text{当 } n \to \infty \text{ 时}).$$

对于线性序列情况，上式可用白噪声的大数定律加以证明. 对于满足式(4-6) 的非

线性平稳序列而言,只有借助于序列的遍历性质. 有关这些内容可参见文献[3].

对于非线性平稳序列而言,其自协方差函数只是序列的二阶矩结构.不像线性序列那样,二阶矩结构与序列的概率结构关系非常密切.例如,式(4-2) 非线性平稳序列 x_t,其自协方差函数 $\gamma_k = 0, k \neq 0$.对于线性序列而言,这样的自协方差函数,只能是白噪声的自协方差函数.但是,在非线性情况下,式(4-2) 的 x_t 显然不是白噪声.

4.1.3 其他非线性模型

在第 3 章中还介绍了 ARMA 模型,它也可看做线性 AR 模型的推广.对于非线性 AR 模型,也可以在形式上推广到**非线性 ARMA 模型**.仿照式(4-5) 和式(4-6),这种推广也有两种形式,即

$$x_t = \psi(x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p}, \varepsilon_t, \varepsilon_{t-1}, \cdots, \varepsilon_{t-p})$$

和

$$x_t = \psi(x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p}, \varepsilon_{t-1}, \cdots, \varepsilon_{t-p}) + \varepsilon_t.$$

但是,无论以上哪种推广形式,既难以对其进行理论研究,也难进行统计分析.所以,在文献中很少有研究讨论非线性 ARMA 模型的文章.但是,对以上某些特殊情况,比如,

$$x_t = \sum_{j=1}^{p} \alpha_j x_{t-j} + \sum_{i,j=1}^{q} \alpha_{ij} x_{t-i} \varepsilon_{t-j} + \varepsilon_t, \tag{4-8}$$

可称之为双线性模型,文献中对它有所研究.

在实际应用中,还有另一类与非线性 AR 模型有关的非线性模型.在经济和金融领域中,许多记录到的数据序列是正值序列,因此,常常先将原序列取对数得到新序列,然后对新序列进行线性 AR 模型拟合.另外,也有先将原序列做其他变换的.从广义上说,对原序列进行变换可称为数据预处理.现在考虑用变换 g 作预处理,即

$$x_t = g(y_t),$$

其中 y_t 是被观测到的原序列.如果 x_t 真的满足线性 AR 模型,则有

$$x_t = \alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1} + \cdots + \alpha_p x_{t-p} + \varepsilon_t, \tag{4-9}$$

其中 α_0 为常数,引入此项是为了使上述模型具有更广泛的适应性.以上的预处理变换 g 一般总是用单值变换,从而有逆变换.记此逆变换为 G,则有

$$G(x_t) = y_t.$$

将式(4-9) 代入上式,可得

$$y_t = G(x_t) = G(\alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1} + \cdots + \alpha_p x_{t-p} + \varepsilon_t). \tag{4-10}$$

由于模型式(4-9) 便于理论研究和拟合,所以,上述的预处理后再拟合线性 AR 模型的方法,在许多领域被广泛接受使用.

4.1.4 非线性 AR 序列的预报

如前所述,对于非线性AR序列而言,其自协方差函数只是二阶矩结构的描述,

它与序列的概率结构相差较多.因此,这里只能使用最小方差的预报准则,即用条件期望求其预报值.

考虑模型式(4-6),在给定 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 时,对 x_{n+1} 的预报由如下的条件期望给出:

$$\begin{aligned}\hat{x}_{n+1} &= E(x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1) \\ &= E(\varphi(x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-p+1}) \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1) \\ &= \varphi(x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-p+1}).\end{aligned} \tag{4-11}$$

但是,对 $x_{n+2}, x_{n+3}, \cdots$ 等的多步预报就不这样简单了.例如,对 x_{n+2} 的预报为

$$\begin{aligned}\hat{x}_{n+2} &= E(\varphi(x_{n+1}, x_n, \cdots, x_{n-p+2}) \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1) \\ &= E(\varphi(\varphi(x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-p+1}) + \varepsilon_{n+1}, x_n, \cdots, x_{n-p+2}) \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1) \\ &= \int \varphi(\varphi(x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-p+1}) + u, x_n, \cdots, x_{n-p+2}) f_\varepsilon(u) \mathrm{d}u,\end{aligned} \tag{4-12}$$

其中 f_ε 为 ε_t 的分布密度函数.

对比线性 AR 模型的 k 步预报公式(3-21)、非线性 AR 模型的一步预报公式(4-11)和两步预报式(4-12),可以作出如下的结论:在线性情况下,无论多少步预报,只与模型的自回归系数有关,与分布无关;在非线性情况下,一步预报只与自回归函数 φ 有关,与分布无关,但是两步或多步预报既与 φ 有关,又与 ε_t 的分布有关.

现在介绍一种实用的预报方法,它不直接涉及 ε_t 的分布函数.假若 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 是满足式(4-6)的平稳非线性 AR 序列的样本,利用式(4-6)可得到残差项 ε_t 的样本:

$$\varepsilon_k = x_k - \varphi(x_{k-1}, \cdots, x_{k-p}) \qquad (k = p+1, p+2, \cdots, n).$$

利用这些白噪声和 $\{x_t\}$ 的样本值,可将式(4-12)中右边的积分用样本平均代替,即

$$\hat{x}_{n+2} \approx \frac{1}{n-p} \sum_{k=p+1}^{n} \varphi(\varphi(x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-p+1}) + \varepsilon_k, x_n, \cdots, x_{n-p+2}). \tag{4-13}$$

这一方法虽然是近似方法,但有很多优点,它不需要用到 ε_t 的分布密度函数,又不用积分计算.在理论上还证明了,当 n 充分大时,式(4-13)与式(4-12)的误差将充分小.

4.2 非线性 AR 模型估计

对实际数据序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 进行自回归模型拟合之前,应当判断它们是非线性序列的样本,还是线性的.如果判断为线性的,则应拟合线性 AR 模型;如果判断为非线性的,则拟合非线性 AR 模型.由于非线性 AR 模型种类很多,且不同种类的非线性 AR 模型拟合方法也很不相同,在拟合非线性 AR 模型时,难易程度差别也很大.这里仅介绍一种便于计算的非线性 AR 模型的拟合方法.

4.2.1 非线性检验

根据数据序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$,判断它们是否为某一非线性序列的样本,称为非

线性检验.解决这一检验问题有两类不同方法，一类是参数型的检验方法，另一类是非参数型的检验方法.所谓参数型的检验方法，是采用如下的对立假设检验：

$$H_0:\{x_t\}\text{ 是线性序列；}$$

$$H_1:\{x_t\}\text{ 属于 A 类非线性序列.}$$

其中 A 类是预先指定的某种特殊非线性序列子类，而且是被有限参数决定的非线性序列，故称为**参数型检验**.例如，A 取为形如(4-8) 式的双线性序列，而且阶数 p 和 q 已知，此时 H_0 和 H_1 有如下等价形式：

$$H_0:\sum_{i,j=1}^{q}|\alpha_{i,j}|=0,$$

$$H_1:\sum_{i,j=1}^{q}|\alpha_{i,j}|\neq 0.$$

虽然不同的非线性有限参数型序列子类 A，总能表示成上述的对立假设，但是，对于不同的子类 A，设计上述的检验统计量的方法却完全不同.目前已有多种不同的上述假设检验方法.由于在实际应用中难于准确地指定非线性序列子类 A，用这类检验方法的功效不稳定.特别是当真模型是非线性模型，且又不属于指定的 A 类时，检验效果可能会很差.这里不去一一列举各种不同的 A 的类型[8].

另一类是**非参数型检验**方法.此类检验的原假设仍如前述，而对立假设改为

$$H_1:\{x_t\}\text{ 不是线性序列.}$$

以上对立假设又称为完全对立假设.虽然这种方法克服了限定非线性类的缺点，但是，在实用中若对非线性子类 A 有明显的先验知识，具体地说，序列 $\{x_t\}$ 或者属于线性类，或者属于 A 类，二者必居其一，则理所当然地应使用参数型检验方法.

解决上述参数型检验问题的基本方法是拉格朗日(Lagrange) 乘子法；解决非参数型检验问题的基本方法是引入科尔莫戈罗夫 - 斯米尔诺夫(Kolmogorov-Smirnov) 检验统计量.由于篇幅所限，这里不再介绍，读者可参阅文献[3].

4.2.2 可加非线性模型估计

引入如下的可加非线性 AR 模型：

$$x_t=\alpha_1 f_1(x_{t-1},x_{t-2},\cdots,x_{t-p})+\alpha_2 f_2(x_{t-1},x_{t-2},\cdots,x_{t-p})+\cdots+\alpha_q f_q(x_{t-1},x_{t-2},\cdots,x_{t-p})+\varepsilon_t,\tag{4-14}$$

其中 ε_t 仍为白噪声；f_i 为 q 个 p 元已知函数；$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_q$ 为未知参数，记 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_q)^{\mathrm{T}}$.显然式(4-14) 是式(4-6) 的一种特例.记

$$f_i(x_{t-1},x_{t-2},\cdots,x_{t-p})=f_{it}\qquad(1\leqslant i\leqslant q),$$

则式(4-14) 可改写成

$$x_t=\alpha_1 f_{1t}+\cdots+\alpha_q f_{qt}+\varepsilon_t.\tag{4-15}$$

上式在形式上与线性回归模型一样，而且应变元 x_t 和自变元 $f_{it}(1\leqslant i\leqslant q)$ 都有观测数据.但是，当 f_{it} 是应变元 x_t 的延迟量的函数时，它就与普通回归模型不同了.当 f_{it} 中有些是非线性函数时，式(4-15) 为非线性自回归模型，这是指，f_{it} 是依赖于

$x_{t-1},x_{t-2},\cdots,x_{t-p}$ 的非线性函数.而模型式(4-15)是关于未知参数 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_q$ 而言的,是以线性形式出现的,所以式(4-15)又与线性回归有相似之处.这使得未知参数容易被估计,也使得形如式(4-14)的模型成为非线性时间序列中被研究和应用最多者.

例1　一阶门限自回归模型

$$x_t=\begin{cases}\alpha_0+\alpha_1x_{t-1}+\varepsilon_t & (x_{t-1}\leqslant 0),\\ \beta_0+\beta_1x_{t-1}+\varepsilon_t & (x_{t-1}>0),\end{cases}\tag{4-16}$$

其中 ε_t 仍为白噪声.若记 $I(x_{t-1}\leqslant 0)$ 和 $I(x_{t-1}>0)$ 为示性函数,则上式可写成

$$x_t=(\alpha_0+\alpha_1x_{t-1})I(x_{t-1}\leqslant 0)+(\beta_0+\beta_1x_{t-1})I(x_{t-1}>0)+\varepsilon_t.$$

形如式(4-16)的模型可以被推广为如下的一般形式:

$$x_t=\sum_{i=1}^{s}(\alpha_{0i}+\alpha_{1i}x_{t-1}+\cdots+\alpha_{pi}x_{t-p})I(x_{t-d}\in R_i)+\varepsilon_t,\tag{4-17}$$

其中 $R_i=(r_i,r_{i+1}]$,$r_1<r_2<\cdots<r_s$,且 $r_1=-\infty$,$r_s=+\infty$;d 为某个正整数.不难将式(4-17)写成式(4-14)的形式,这里从略,详见文献[8].

例2　指数系数自回归模型

$$x_t=\alpha_0+\alpha_1x_{t-1}+\alpha_2x_{t-1}e^{-rx_{t-1}^2}+\varepsilon_t,\tag{4-18}$$

其中 ε_t 仍为白噪声,r 为已知的正常数.当 $|\alpha_1|<1$ 时,易见式(4-7)的条件成立,从而式(4-18)有平稳解.此模型是帮助理解条件式(4-7)的典型例子.另一方面,当 r 已知时,式(4-18)显然具有式(4-15)的形式.关于式(4-18)的一般推广,这里不再列举.

现在讨论模型式(4-14)的参数估计问题.在这一小节里,考虑模型阶数 p 和 q 为已知的情况,关于阶数未知时的估计问题,将在下一小节里讨论.利用式(4-15)与式(4-14)的等价形式,记 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_p)^{\mathrm T}$,

$$\boldsymbol{X}=(x_{p+1},x_{p+2},\cdots,x_n)^{\mathrm T},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}=(\varepsilon_{p+1},\varepsilon_{p+2},\cdots,\varepsilon_n)^{\mathrm T},$$

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}f_{1p+1} & f_{2p+1} & \cdots & f_{qp+1}\\ f_{1p+2} & f_{2p+2} & \cdots & f_{qp+2}\\ \cdots & \cdots & & \cdots\\ f_{1n} & f_{2n} & \cdots & f_{qn}\end{bmatrix},$$

则式(4-15)可写成如下缩写形式:

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A\alpha}+\boldsymbol{\varepsilon}.\tag{4-19}$$

这正是大家熟知的线性回归的缩写形式,于是,$\boldsymbol{\alpha}$ 的最小二乘估计为

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}=[\boldsymbol{A}^{\mathrm T}\boldsymbol{A}]^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm T}\boldsymbol{X},\tag{4-20}$$

而且,ε_t 的方差 σ^2 的估计为

$$\widehat{\sigma^2}=\frac{1}{n-p}\{\|\boldsymbol{X}\|^2-\boldsymbol{X}^{\mathrm T}\boldsymbol{A}[\boldsymbol{A}^{\mathrm T}\boldsymbol{A}]^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm T}\boldsymbol{X}\}.\tag{4-21}$$

4.2.3 非线性自回归阶数的估计

在非线性情况下，自回归阶数的估计分为两类：第一类是模型类型已知，而参数个数未知的情况，比如式(4-14)中的 q 是未知的，即属此类估计问题；第二类是模型类型未知，自回归阶数也未知的情况，比如式(4-5)中的 φ 或式(4-6)中的 φ 未知，且阶数 p 也未知，即属此类.

第一类估阶问题实质上是参数型的，即非线性自回归依赖于有限参数，但其个数需要估计. 由于参数型的非线性自回归的种类很多，其阶数估计方法又各不相同，所以，这里只选择一种类型加以讨论，即非线性可加模型式(4-14)的估计问题. 注意到式(4-14)有式(4-15)的等价形式，其中只有 q 为未知阶数，p 是已知的，因此，这属于回归模型阶数估计问题. 以 q 表示待定阶数，利用式(4-20)、式(4-21)计算相应于 q 的 $\widehat{\sigma^2}$，记为 $\widehat{\sigma^2}(q)$；用式(3-31)中 AIC 准则，计算下面的 AIC 准则函数：

$$\mathrm{AIC}(q) = \log\widehat{\sigma^2}(q) + \frac{2q}{n} \qquad (0 \leqslant q \leqslant Q), \tag{4-22}$$

其中 Q 为真阶数的某个指定上界，或取为与 $\log n$ 同阶的正整数. 寻找 $\hat{q}$ 使得 $\mathrm{AIC}(\hat{q})$ 是 $\mathrm{AIC}(q)$ 在 $0 \leqslant q \leqslant Q$ 中的最小值，并以 $\hat{q}$ 作为真阶数的估计. 顺便指出，当 Q 很大，而且函数 $f_1(x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p}), f_2(x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p}), \cdots$ 的前后次序并无实际含义时，以上方法给出的 $\hat{q}$ 往往偏大. 为了尽量引入有效的 $f_i(x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p})$ 进入模型式(4-14)中，应当对式(4-15)使用回归选元方法，比如使用熟知的逐步回归方法，挑选相应于 $a_i \neq 0$ 的 f_i 进入式(4-14). 具体方法见逐步回归，或子集 AIC 选元方法，可参见文献[2].

第二类定阶问题属于非参数型的，即自回归模型属于一般非参数型的，而且阶数是待估计的. 不妨说此定阶问题即是估计式(4-6)中的 p 值，而且自回归函数 $\varphi(x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p})$ 是非参数型的未知函数. 直观看来，这是比前一种定阶更困难的问题，也是具有更普遍意义的问题. 下面介绍 **CV(cross-volidation) 定阶方法**.

设有观测序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，对于 $k = 0, 1, \cdots, p$ 分别做形如式(4-6)的 k 阶非线性自回归模型拟合. 也就是根据上述观测序列，对 $\varphi(x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-k})$ 进行非参数估计. **非参数估计**的方法很多，这里选用核估计方法. 所谓 CV 方法，就是利用数据互相验证的方法. 在这里的做法是：在对 $\varphi(x_{j-1}, x_{j-2}, \cdots, x_{j-p})$ 进行估计时，使用数据序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，并从中去掉 x_j 数据，然后用**核估计方法**给出 φ 的估计，即

$$\hat{\varphi}_j(x_{j-1}, x_{j-2}, \cdots, x_{j-k}) = \frac{\sum\limits_{\substack{s=k+1 \\ s \neq j}}^{n} \prod\limits_{i=1}^{k} K\left(\frac{x_{j-i} - x_{s-i}}{h_n}\right) x_s}{\sum\limits_{\substack{s=k+1 \\ s \neq j}}^{n} \prod\limits_{i=1}^{k} K\left(\frac{x_{j-i} - x_{s-i}}{h_n}\right)},$$

其中 h_n 为随 n 增加而趋于零的正数列，K 为适当选取的核函数. 计算

$$\mathrm{CV}(k) = \frac{1}{n-k}\sum_{j=k+1}^{n}(x_j - \hat{\varphi}_j(x_{j-1}, x_{j-2}, \cdots, x_{j-k}))^2 w(x_{j-1}, x_{j-2}, \cdots, x_{j-k}), \tag{4-23}$$

其中 w 为某个非负权函数.最后,求出 $\hat{p}$ 使得 $\mathrm{CV}(\hat{p})$ 在 $0 \leqslant p \leqslant P$ 中达到极小值,即

$$\mathrm{CV}(\hat{p}) = \min_{0\leqslant k\leqslant P} \mathrm{CV}(k),$$

以 $\hat{p}$ 作为未知阶数的估计.在适当条件下,这一估计被证明是真阶数的相容估计.

5 多元时间序列模型

5.1 多元平稳序列

如果时间序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 中的元素 x_t 都用矢量 X_t 代替,记

$$X_t = (x_{1t}, x_{2t}, \cdots, x_{mt})^{\mathrm{T}},$$

其中 m 是 X_t 的维数,于是 $X_1, X_2, \cdots$,成为**多元时间序列**.第4章中的随机序列和平稳序列概念,均能无实质性困难地被推广到多元时间序列.这里不逐一做平行推广叙述.由于文献中还很少涉及多元非线性序列的研究,所以,这里只介绍**多元线性序列**的内容.

记 $M_t = EX_t$ 为多元序列 X_t 的均值函数,则 M_t 是一个矢量函数.在平稳情况下,$M_t = M$,与 t 无关,而且在后面的讨论中常考虑 $M = 0$ 的情况.对于多元平稳序列 X_t,必有

$$EX_tX_{t+k}^{\mathrm{T}} = EX_{t-k}X_t^{\mathrm{T}} \qquad (\text{对于任何 } t).$$

记

$$\Gamma_k = EX_tX_{t+k}^{\mathrm{T}} \qquad (k = 0, \pm 1, \cdots)$$

为多元序列 X_t 的协方差阵函数.易见,

$$\Gamma_k = EX_tX_{t+k}^{\mathrm{T}} = \Gamma_{-k}^{\mathrm{T}}. \tag{5-1}$$

对比一元情况,在那里 $\gamma_k = \gamma_{-k}$,当然也可看成 $\gamma_k = \gamma_{-k}^{\mathrm{T}}$.但是,在多元情况下,$\Gamma_k = \Gamma_{-k}$ 不是总成立的.另外,在一元情况下,γ_k 表示了 x_t 与 x_{t+k} 的协方差值,同样,在多元情况下,Γ_k 表示了 X_t 与 X_{t+k} 的协方差关系.注意,Γ_k 本身又是矩阵,特别是 Γ_0,它描述了 $X_t = (x_{1t}, x_{2t}, \cdots, x_{mt})^{\mathrm{T}}$ 中不同分量的协方差值.为了区别这些变量关系,将 Γ_k 中的对角线元素称为了序列的自协方差函数,对角线以外的元素称为不同子序列之间的互协方差函数.以 $\gamma_k(i,j)$ 代替 Γ_k 的第 i 行 j 列元素,易见,

$$\gamma_k(i,i) = Ex_{it}x_{it+k},$$

$$\gamma_k(i,j) = Ex_{it}x_{jt+k} \qquad (i \neq j),$$

分别为 X_t 的第 i 分量 x_{it} 的自协方差函数，以及 x_{it} 与 x_{jt} 的互协方差函数. 由此可见，当 X_t 为平稳时，其每个分量也必然平稳.

现在介绍线性序列在多元情况下的推广. 首先确定多元白噪声为相互独立同分布的矢量序列，记为 $\{\varepsilon_t\}$，

$$\varepsilon_t = (\varepsilon_{1t}, \varepsilon_{2t}, \cdots, \varepsilon_{mt})^{\mathrm{T}},$$

其中 $\{\varepsilon_{it}\}$ 都是前述的白噪声，但是，ε_{it} 和 ε_{jt} 可以相关，换言之，

$$E\varepsilon_t = 0,$$

$$E\varepsilon_t\varepsilon_t^{\mathrm{T}} = \Gamma, \quad E\varepsilon_t\varepsilon_s^{\mathrm{T}} = 0 \qquad (t \neq s).$$

于是，仿照式(3-1) 定义多元线性序列如下：

$$X_t = \sum_{j=0}^{\infty}\psi_j\varepsilon_{t-j}, \quad \sum_{j=0}^{\infty}\|\psi_j\|^2 < \infty, \tag{5-2}$$

其中 $\{\varepsilon_t\}$ 为多元白噪声；ψ_j 为系数方阵；$\|\psi_j\|$ 表示矩阵 ψ_j 的范数.

和在一元情况下的讨论一样，对一般多元线性序列而言，由于自由参数无穷多个，实际并无使用价值，只有满足有限参数模型的线性序列才有广泛的应用价值.

5.2 多元 ARMA 模型

5.2.1 多元 AR 模型

多元自回归模型有如下形式：

$$X_t = A_1X_{t-1} + A_2X_{t-2} + \cdots + A_pX_{t-p} + \varepsilon_t, \tag{5-3}$$

其中 $A_1, A_2, \cdots, A_p$ 为系数矩阵；p 为自回归阶数；$\varepsilon_t = (\varepsilon_{1t}, \varepsilon_{2t}, \cdots, \varepsilon_{mt})^{\mathrm{T}}$ 为 m 元白噪声；$X_t = (x_{1t}, x_{2t}, \cdots, x_{mt})^{\mathrm{T}}$ 为**多元自回归序列**. 记

$$Y_t = \begin{bmatrix} X_t \\ X_{t-1} \\ \vdots \\ X_{t-p+1} \end{bmatrix}, \quad \Phi = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 & \cdots & A_p \\ I & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}, \quad E_t = \begin{bmatrix} \varepsilon_t \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

则式(5-3) 可写成

$$Y_t = \Phi Y_{t-1} + E_t. \tag{5-4}$$

可见，高阶自回归模型总可以改写成维数较高的一阶自回归模型. 不失一般性，以下只讨论一阶多元自回归模型.

1. 多元一阶自回归模型

考虑多元一阶自回归模型

$$\widehat{X}_t = AX_{t-1} + \varepsilon_t. \tag{5-5}$$

当且仅当 A 的特征根的最大模小于 1 时，此模型有平稳解. 为了与平稳性条件式(3-10) 相联系，可将上述条件改写为

$$|I - Au| \neq 0 \qquad (\text{对于一切 } |u| \leqslant 1),$$

其中 a 表示任意的复数. 在上述条件下,易见

$$X_t = \sum_{j=0}^{\infty} A^j \varepsilon_{t-j} \tag{5-6}$$

是收敛级数,而且满足式(5-5). 进一步由式(5-6)可知, ε_t 与 $X_{t-s}(s \geqslant 1)$ 独立.

利用式(5-5)可知,多元一阶自回归序列的一步预报为

$$\hat{X}_{n+1} = AX_n.$$

运用式(5-5)的递推关系,可知两步预报为

$$\begin{aligned}\hat{X}_{n+2} &= E\{AX_{n+1} + \varepsilon_{n+2} \mid X_n\} \\ &= E\{A^2X_n + A\varepsilon_{n+1} + \varepsilon_{n+2} \mid X_n\} \\ &= A^2X_n.\end{aligned}$$

类似地, X_{n+k} 的预报值为

$$\hat{X}_{n+k} = A^kX_n \qquad (k \geqslant 1). \tag{5-7}$$

利用式(5-5)还可知,以 X_{t-1} 同乘式(5-5)两边,并求期望可得

$$\Gamma_1^{\mathrm{T}} = A\Gamma_0. \tag{5-8}$$

根据上式,可得到 A 的矩估计,即

$$\hat{A} = \hat{\Gamma}_1^{\mathrm{T}}\hat{\Gamma}_0^{-1},$$

其中

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma}_0 &= \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}(X_t - \overline{X})(X_t - \overline{X})^{\mathrm{T}}; \\ \hat{\Gamma}_1 &= \frac{1}{n}\sum_{t=2}^{n}(X_t - \overline{X})(X_{t-1} - \overline{X})^{\mathrm{T}}; \\ \overline{X} &= \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}X_t.\end{aligned} \tag{5-9}$$

2. 多元自回归模型的定阶问题

在此,要指出多元自回归模型的重要缺欠之处. 在一元情况下,在一个 p 阶自回归模型中,含有未知系数 p 个,未知方差1个,共有 $p+1$ 未知参数,需要根据观测序列进行估计. 在多元情况下,在一个 m 元 p 阶自回归模型中,含有未知系数 $p \times m^2$ 个和一个未知方差矩阵 Γ, Γ 中有 $m(m+1)/2$ 个自由参数,故总共有 $p \times m^2 + m(m+1)/2$ 个自由参数,它们都是需要估计的. 在气象和经济领域里,对月记录序列建模时,经常要用到多元高阶(比如 $p \geqslant 12$)自回归模型. 以 $m=5, p=12$ 为例,自回归模型式(5-3)中有315个未知参数. 如此众多的未知参数将带来两种困难:第一种是对数据序列样本长度的要求过大,这在经济领域中有时难以满足;第二种是即使有充足的数据能够对众多的参数估计得较好,使用和理解如此众多参数也是一件很困难的事.

为了讨论上述问题,仍要回到式(5-3)的模型,并且考虑式(5-3)中的每个分量序列. 由于不同分量的模型形式相同,不妨只写出第一分量的模型,即

$$
\begin{aligned}
x_{1t} = &\ \alpha_{11}x_{1t-1} + \alpha_{12}x_{1t-2} + \cdots + \alpha_{1p}x_{1t-p} + \\
&\ \alpha_{21}x_{2t-1} + \alpha_{22}x_{2t-2} + \cdots + \alpha_{2p}x_{2t-p} + \cdots + \\
&\ \alpha_{m1}x_{mt-1} + \alpha_{m2}x_{mt-2} + \cdots + \alpha_{mp}x_{mt-p} + \varepsilon_{1t}.
\end{aligned} \tag{5-10}
$$

在上式中,右边第一组求和表现出 x_{1t} 的 p 阶自回归关系;其他$(m-1)$组求和反映了 x_{1t} 与其他诸分量的历史值的联系.如果将自回归项当作内生变量,其他项可看作外生变量,那么式(5-10)可称为自回归与回归的混合模型.不难看到,式(5-10)也可写成式(4-15)的回归形式.于是,为了减少在式(5-10)中的多余参数(指 $\alpha_{ij}=0$ 者)个数,自然可以使用回归选元方法挑选式(5-10)中变元.以被挑中的变元拟合式(5-10)的模型,称为该模型的**疏系数模型**.除了逐步回归方法,还有很多回归选元方法,其中如前所述 AIC 和 BIC 准则方法,也是常用的方法,还有一些便于计算的简化方法,如向前法、向后法等等,可参阅文献[2].

对于 $\boldsymbol{X}_t$ 的其他分量 $x_{2t}, x_{3t}, \cdots, x_{mt}$,按拟合式(5-10)相同的方法,可以拟合各自的子模型.最后,将这 m 个子模型联合在一起,就得到了式(5-3)的总体模型.须注意,在拟合式(5-10)的疏系数模型时,由于使用了回归选元方法,其中很多项不出现在式(5-10)中,这意味着相应的 α_{ij} 均等于0,所以,在拟合后的式(5-3)中,诸 $\boldsymbol{A}_k$ 的估计 $\widehat{\boldsymbol{A}}_k$ 中包括了许多零元素.下面用一个例子说明这一过程.

如果 $m=2, p=12$,而且两个变元的疏系数模型分别被选定为(比如用逐步回归)

$$
\begin{aligned}
x_{1t} &= 1.1x_{1t-1} + 0.9x_{1t-6} + 0.2x_{1t-12} + \cdots + 2.1x_{2t-1} + 1.5x_{2t-6} + \varepsilon_{1t}, \\
x_{2t} &= 0.8x_{2t-1} + 1.3x_{1t-1} + \varepsilon_{2t},
\end{aligned}
$$

那么,由此联合而成的式(5-3)为

$$
\boldsymbol{X}_t = \begin{bmatrix} 1.1 & 2.1 \\ 1.3 & 0.8 \end{bmatrix} \boldsymbol{X}_{t-1} + \begin{bmatrix} 0.9 & 1.5 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{X}_{t-6} + \begin{bmatrix} 0.2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{X}_{t-12} + \begin{bmatrix} \varepsilon_{1t} \\ \varepsilon_{2t} \end{bmatrix}.
$$

在上式中共有非零参数7个.若不用选元方法而直接拟合二元12阶自回归模型,其自回归系数共有 $2^2 \times 12 = 48$ 个.

在分别拟合完子模型以后,可得各自的拟合残差 $\widehat{\varepsilon}_{kt}(k=1,2,\cdots,m)$,作为相应的 ε_{kt} 样本,从而可根据 $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t = (\widehat{\varepsilon}_{1t}, \widehat{\varepsilon}_{2t}, \cdots, \widehat{\varepsilon}_{mt})^{\mathrm{T}}, p+1 \leqslant t \leqslant n$,对 $\boldsymbol{\varepsilon}_t$ 的协方差矩阵 $E\boldsymbol{\varepsilon}_t\boldsymbol{\varepsilon}_t^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{\Gamma}$ 进行估计,即

$$
\widehat{\boldsymbol{\Gamma}} = \frac{1}{n-p}\sum_{t=p+1}^{n} \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^{\mathrm{T}}.
$$

5.2.2 多元 ARMA 模型

多元 ARMA 模型可以在形式上从式(3-11)推广而来,即

$$
\boldsymbol{X}_t = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{X}_{t-1} + \cdots + \boldsymbol{A}_p\boldsymbol{X}_{t-p} - \boldsymbol{B}_1\boldsymbol{\varepsilon}_{t-1} - \cdots - \boldsymbol{B}_q\boldsymbol{\varepsilon}_{t-q} + \boldsymbol{\varepsilon}_t, \tag{5-11}
$$

其中 $\boldsymbol{\varepsilon}_t$ 为多元白噪声;$\boldsymbol{A}_i$ 和 $\boldsymbol{B}_j$ 为参数矩阵.关于此模型的平稳性和平稳解等内容,容易从一元 ARMA 模型平行推广而来.但是,上述 ARMA 模型式(5-11)的参数不具

有可识别性.确切地说,满足式(5-11)的平稳序列的自协方差矩阵函数,与式(5-11)的参数 $A_1,A_2,\cdots,A_p$ 和 $B_1,B_2,\cdots,B_q$ 以及 $\Gamma=E\varepsilon_t\varepsilon_t^{\mathrm{T}}$ 不具有一一对应的关系.这种不可识别的问题,在一元 ARMA 模型中并不出现.换而言之,一元 ARMA 模型式(3-11)在满足平稳性和可逆性条件时,其模型参数 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_p,\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_q$ 和 $\sigma^2=E\varepsilon_t^2$ 被满足该模型的平稳序列的自协方差结构唯一决定.这一特征是保证一元 ARMA 模型有相容性估计方法的必要条件.下面举例说明多元 ARMA 模型的不可识别性.

考虑如下的二元一阶 AR 模型:

$$X_t=\begin{bmatrix}0 & 2\\ 0 & 0\end{bmatrix}X_{t-1}+\varepsilon_t. \tag{5-12}$$

注意上式中的系数矩阵 A 满足

$$A=\begin{bmatrix}0 & 2\\ 0 & 0\end{bmatrix},\quad A^k=A^2=0\qquad(k\geqslant 3),$$

将式(5-12)与上述两式联合,并迭代,得

$$X_t=AX_{t-1}+\varepsilon_t=A^2X_{t-2}+A\varepsilon_{t-1}+\varepsilon_t=A\varepsilon_{t-1}+\varepsilon_t. \tag{5-13}$$

上式表明二元一阶 AR 模型式(5-12)与二元一阶 MA 模型式(5-13)是等价的,尽管 $A\neq 0$.易见,一元一阶 AR 模型和一元一阶 MA 模型是不可能等价的,除非其系数 $\alpha=0$.

为了克服多元 ARMA 模型的不可识别性,有不少研究者提出了多元 ARMA 模型的典则型方法,即提出各种约束条件,使多元 ARMA 模型的参数能被唯一决定.但是,各种典则型方法都给建模方法带来许多计算方面的麻烦,这里不再深入讨论.另一种回避不可识别性的方法是,只考虑 AR 模型,因为此类模型没有不可识别性问题.关于此类模型,在前一小节已作了介绍.

5.3 多元求和模型

多元序列的求和模型也可以在形式上从一元求和模型推广而来,比如**多元一阶求和序列**为

$$Y_t=\sum_{s=1}^{t}X_s, \tag{5-14}$$

其中 X_t 为多元 AR 模型,即满足

$$X_t=A_1X_{t-1}+\cdots+A_pX_{t-p}+\varepsilon_t.$$

上式与式(5-3)完全相同.类似地,还可以推广出更高阶的求和序列.这里仅限于讨论一阶的情况,且侧重于讨论多元求和模型与一元情况的差异,以及遇到的新的值得重视和研究的问题.

考虑一元一阶求和序列:

$$y_t=\sum_{s=1}^{t}x_s\qquad(t\geqslant 1), \tag{5-15}$$

其中 x_s 为 AR 序列. 容易验证, 上式中的 y_t 一定不是平稳的, 而且满足

$$y_t - y_{t-1} = x_t \qquad (t \geqslant 1), \tag{5-16}$$

即 y_t 的差分为平稳序列. 还须注意, 平稳 AR 序列的差分序列仍是平稳的. 以 p 阶模型为例, 若

$$x_t = \alpha_1 x_{t-1} + \cdots + \alpha_p x_{t-p} + \varepsilon_t, \tag{5-17}$$

则差分序列 $u_t = x_t - x_{t-1}$ 满足

$$u_t = \alpha_1 u_{t-1} + \cdots + \alpha_p u_{t-p} + \varepsilon_t - \varepsilon_{t-1}. \tag{5-18}$$

对比以上两式可知, 平稳 AR 序列 x_t 的差方序列 u_t 满足平稳 ARMA 模型式(5-18), 其自回归部分与式(5-17) 相同, 其滑动平均部分是不可逆的. 由此可见, 当观测序列为平稳序列时, 分析其差分序列反不如分析原序列.

多元求和序列与上述分析的相同与相异之处表现如下.

其一, 多元平稳 AR 序列的差分序列仍是平稳的, 而且是 ARMA 型的多元平稳序列. 如前一小节所述, 多元 ARMA 模型存在着的不可识别问题, 估计时会遇到麻烦, 所以, 对多元数据序列采用差分处理时应当慎重. 若观测序列不是求和序列, 差分后的序列分析会更复杂. 这一点与一元情况是相同的.

其二, 一元求和模型式(5-15) 的 y_t 一定是不平稳的, 除非 $x_s = 0$ 为不足道的特殊情况. 相应的多元模型式(5-14) 中的 $\boldsymbol{Y}_t$ 也一定是不平稳的, 除非 $\boldsymbol{X}_s = 0$. 但是, 在多元情况下, 不平稳的 $\boldsymbol{Y}_t$ 序列中还可能有平稳的分量. 比如 $m = 2, \boldsymbol{X}_t = (x_{1t}, x_{2t})^{\mathrm{T}}$, 而且 $x_{2t} \equiv 0$, 易见,

$$y_{1t} = \sum_{s=1}^{t} x_{1s},$$

$$y_{2t} = \sum_{s=1}^{t} x_{2s} = 0.$$

上式说明 $\boldsymbol{Y}_t = (y_{1t}, y_{2t})^{\mathrm{T}}$ 中的第一分量不平稳, 第二分量是特殊的平稳序列, 即 $y_{2t} = 0$. 依多元平稳序列的定义, $\boldsymbol{Y}_t$ 是不平稳的. 这种部分分量平稳, 部分分量不平稳的求和序列, 在一元情况下是不存在的. 根据这种差异, 以及前面关于差分处理方法的讨论, 对于多元求和序列, 采用简单的差分, 或完全不用差分的处理方法, 都不是最合适的处理方法, 应当寻找针对特殊情况的多元求和模型的描述方法及其统计方法.

下面针对多元求和序列的特殊性提出适当的差分分析方法. 应当分析清楚这种特殊性的具体内容. 为叙述方便, 又不失一般性, 考虑 $m = 2$ 的情况, 即 $\boldsymbol{Y}_t = (y_{1t}, y_{2t})^{\mathrm{T}}$. 当 $\boldsymbol{Y}_t$ 不是多元平稳序列时, 按照其分量(包括其线性组合) 的平稳性与非平稳性的不同情况, 有如下四种不同分类:

(1) y_{1t} 是平稳的, y_{2t} 是不平稳的;

(2) y_{2t} 是平稳的, y_{1t} 是不平稳的;

(3) y_{1t} 和 y_{2t} 都是不平稳的, 但是存在实数 c_1 和 c_2(不为零值), 使得 $c_1 y_{1t} + c_2 y_{2t}$ 是平稳的;

(4) 不存在 c_1 和 c_2,使得 $c_1y_{1t}+c_2y_{2t}$ 为平稳的.

对比分析以上四种情况是有趣的.在(1)和(2)情况下,Y_t 的分量化分为平稳与非平稳两类.在(3)情况中,每个分量都不平稳,但是存在着它们的组合序列是平稳的情况.在(4)情况下,无论 Y_t 的分量还是各种组合,都是不平稳的.

若观测序列 $Y_1,Y_2,\cdots,Y_n$ 是二维序列,为了对其进行模型分析,应当对其分量进行第3章中介绍的关于求和序列的检验,判断 y_{1t} 和 y_{2t} 是否为求和序列.根据检验结果,并按照(1)和(2)的分类,判断它们是否属于这两类.若属于此两类,则按分量分别进行 AR 模型拟合,以及差分后 AR 模型拟合,详细叙述见第3章有关内容.如果均不属于第(1)、(2)类,则应检验 Y_t 是否属于(3)类.具体方法如下:

求其极小值解,即求

$$\inf_{c_1^2+c_2^2=1}\sum_{t=1}^{n}(c_1y_{1t}+c_2y_{2t})^2,$$

记 $\hat{c}_1$ 和 $\hat{c}_2$ 为其解,计算序列 $(\hat{c}_1y_{1t}+\hat{c}_2y_{2t})$,$t=1,2,\cdots,n$,用一阶求和序列检验方法判断此序列是否为求和序列.

若判断此序列是平稳,则属于第(3)类情况,否则只有属于第(4)类情况.当属于(3)类时,取 $z_t=\boldsymbol{T}Y_t$,其中

$$\boldsymbol{T}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ c_1 & c_2\end{bmatrix}\quad 或\quad\begin{bmatrix}c_1 & c_2\\ 0 & 1\end{bmatrix},$$

当 $c_2\neq 0$ 时,$\boldsymbol{T}$ 取上式右边前一方阵,否则取后一个.根据(3)类的规定,z_t 的两个分量必有一个平稳,一个非平稳.此时可按(1)、(2)类方法处理 z_t 的统计问题.注意将上面提到的 c_1 和 c_2 用 $\hat{c}_1$ 和 $\hat{c}_2$ 代替后,$\boldsymbol{T}$ 可有估计 $\hat{\boldsymbol{T}}$.类似地 $\hat{z}_t=\hat{\boldsymbol{T}}Y_t$.于是可按前述方法对 $\hat{z}_t$ 进行模型拟合分析.

若判断 $\hat{c}_1y_{1t}+\hat{c}_2y_{2t}$ 为非平稳,则 Y_t 属于第(4)类.此时,是一个"纯粹"的二元非平稳序列,并可用式(5-14)近似描述,进而还可用多元 AR 模型描述式(5-14)中的 X_t 序列.具体统计方法可见前两节.

在经济领域中,多元非平稳序列会经常遇到,比如某国的工业总产值、外贸出口进口总值等.在经济领域中许多变量之间,有些要满足一定的平衡关系,有些又有同步变化的趋势.例如某城市居民的月平均收入 y_{1t} 与支出 y_{2t},单看每一个 y_{it} 都是非平稳的,可是存在 c_1 和 c_2 使 $\hat{c}_1y_{1t}+\hat{c}_2y_{2t}$ 近似为平稳的.在经济学界称这种现象为**协整**(co-intergration)或协和.

协整现象在经济界比较普遍存在,近年来对于协整的理论、方法与应用研究取得迅速发展,可见文献[5].在协整的理论与方法研究中,包含了上面叙述的简单情况,也包括了 $m>2$ 以及高阶求和的情况.通过前面对 $m=2$ 情况的讨论,可以想像,更一般情况是非常复杂的.

6　时变条件方差模型

6.1　ARCH模型

6.1.1　新息序列的条件方差

第3章和第4章论及了用条件期望对序列未来值作预报的方法.其实,对于任何平稳序列 x_t,都可以用类似的方法给出一步预报,即

$$\widehat{x}_{n+1} = E(x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots), \tag{6-1}$$

特别是,当

$$\widehat{x}_{n+1} = E(x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-p+1}) \tag{6-2}$$

时,称 x_t 为 p 阶自回归序列,那么,如此定义的自回归序列与前几章中出现的自回归序列有没有区别呢?为了说清楚这一问题,须引入一步预报的误差 e_{n+1} 的概念,

$$e_{n+1} = x_{n+1} - \widehat{x}_{n+1}. \tag{6-3}$$

根据 $\widehat{x}_{n+1}$ 的定义式(6-1)可知,

$$E(e_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-p+1}) = 0. \tag{6-4}$$

在概率论中,称 e_{n+1} 为鞅差序列.在工程中又常称式(6-3)中的 e_{n+1} 为**新息序列**,因为

$$x_{n+1} = \widehat{x}_{n+1} + e_{n+1}$$

可视 x_{n+1} 为其预报量与新息相加.按照式(6-2)、式(6-3)的定义,新息序列必为一平稳鞅差序列.进一步,还可以仿照式(6-1)定义一步条件方差,即

$$\begin{aligned}
\mathrm{var}(x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots) &= \mathrm{var}(e_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots) \\
&= E(e_{n+1}^2 \mid x_n, x_{n-1}, \cdots) - \{E(e_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots)\}^2 \\
&= \sigma^2(x_n, x_{n-1}, \cdots).
\end{aligned} \tag{6-5}$$

上式表明,x_{n+1} 的**条件方差**,即新息 e_{n+1} 的条件方差 $\sigma^2(x_n, x_{n-1}, \cdots)$ 是 $x_n, x_{n-1}, \cdots$ 的函数.

比较线性自回归模型式(3-7)和非线性自回归模型式(4-6),容易看出,它们的新息序列就是 ε_{n+1}.在那里,ε_{n+1} 被假定为白噪声序列,而且与 $x_n, x_{n-1}, \cdots$ 独立,从而有

$$\mathrm{var}(x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots) = \mathrm{var}(e_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots) = E\varepsilon_{n+1}^2 = \sigma^2. \tag{6-6}$$

对比式(6-5)和式(6-6)可知,本章的自回归模型与式(3-7)和式(4-6)自回归模型是有区别的.其区别在于:这里的新息序列是鞅差序列,而在前几章中的自回归序列的新息序列是白噪声.

显然,式(6-3)的新息序列满足式(6-4)和式(6-5)是自然结果,假定它是白噪

声序列往往是不符合实际的.在金融领域中,人们关心式(6-2)的一步预报,但是,更关心式(6-5)的条件方差.特别是在期权、期货和证券市场中,式(6-5)中的 $\sigma^2(x_n, x_{n-1}, \cdots)$ 往往不是常数.由于式(6-5)中的 $\sigma^2(x_n, x_{n-1}, \cdots)$ 和新息 e_{n+1} 的结构太复杂,又是非参数性的,恩格尔(Engle)提出了用 **ARCH**(autoregressive conditional heteroscedasiticity)**模型**近似描述这种时变条件方差现象,并能够较好地刻画金融中风险变化的统计规律.

6.1.2 ARCH 模型

ARCH 模型为

$$\begin{cases} x_t \mid X_{t-1} \sim N(0, h_t), & (6\text{-}7) \\ h_t = \alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2, & (6\text{-}8) \end{cases}$$

其中 $X_{t-1} = (x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots)$ 表示到 $t-1$ 时刻为止的全部观测信息.式(6-7)表示在给定 X_{t-1} 条件下 x_t 的条件分布是正态的,其条件均值为0,条件方差为 h_t;式(6-8)表示 h_t 是 x_t^2 的自回归加权和.而且,为了保证 $h_t > 0$,总假定

$$\alpha_0 > 0, \alpha_1 \geqslant 0, \alpha_2 \geqslant 0, \cdots, \alpha_p \geqslant 0;$$

为了保证 h_t 为平稳的,还假定

$$\sum_{i=1}^{p} \alpha_i < 1. \tag{6-9}$$

为了便于理解式(6-7)和式(6-8)的 ARCH 模型,可写出它的一种等价形式:

$$x_t = \varepsilon_t(\alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2)^{1/2}, \tag{6-10}$$

其中 ε_t 为正态白噪声序列,而且 $\varepsilon_t \sim N(0,1)$.根据 ε_t 与 $(x_{t-1}, \cdots, x_{t-p})$ 相互独立,可立刻得到式(6-7)和式(6-8).对比式(4-5)和式(6-10)可知,式(6-10)是式(4-5)的特例.再将式(6-10)与式(4-6)相比较可知,式(4-6)是可加噪声的 AR 模型,而式(6-10)是乘积噪声 AR 模型,二者之间有一定的联系.这可从以下事实看出:

令

$$y_t = \log x_t^2, \quad \eta_t = \log \varepsilon_t^2.$$

将式(6-10)两边同时平方,然后再取对数,得

$$y_t = (\alpha_0 + \alpha_1 e^{y_{t-1}} + \cdots + \alpha_p e^{y_{t-p}})^{1/2} + \eta_t. \tag{6-11}$$

上式即属于式(4-6)的可加噪声 AR 模型.

6.1.3 ARCH 模型的估计

为了解决 ARCH 模型的估计问题,将式(6-10)两边同时平方,可得

$$\begin{aligned} x_t^2 &= \varepsilon_t^2(\alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2) \\ &= \alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2 + (\varepsilon_t^2 - 1)(\alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2) \\ &= \alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2 + \xi_t, \end{aligned} \tag{6-12}$$

其中 $\xi_t = (\varepsilon_t^2 - 1)(\alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2)$.在式(6-9)条件下,式(6-10)有平稳解;再由正态白噪声 ε_t 服从 $N(0,1)$ 分布可知,

$$E(\xi_t \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p}) = 0.$$

这表明 ξ_t 是鞅差序列,也是 x_t^2 序列的新息序列.若令 $z_t = x_t^2$,则式(6-12)可写成

$$z_t = \alpha_0 + \alpha_1 z_{t-1} + \cdots + \alpha_p z_{t-p} + \xi_t. \tag{6-13}$$

上式就是在6.1.1小节中提到的线性自回归模型,但与式(3-7)的自回归模型有区别,其差别就在于新息项的结构不同.

利用式(6-12)和观测数据序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$,可以得到相应的自回归模型式(6-13)和数据 $z_1, z_2, \cdots, z_n$.于是利用回归模型的最小二乘估计或矩估计方法(见3.2节)可对式(6-8)中的未知参数 $\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_p$ 进行估计.

如果式(6-13)模型中的阶数 p 是未知的,利用式(6-13)和第3章中的AIC准则方法,可以根据样本序列对 p 进行估计.

利用 ε_t 的正态分布假定,还可以给出ARCH模型参数的极大似然估计.在已给观测样本序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 后,其似然函数为

$$\begin{aligned} &L(x_1, x_2, \cdots, x_n \mid \alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_p) \\ &= \prod_{t=p+1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,(\alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2)^{1/2}} \times \\ &\quad \exp \frac{-x_t^2}{2(\alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2)} f(x_1, \cdots, x_p), \end{aligned}$$

其中 f 是 $x_1, x_2, \cdots, x_p$ 的联合分布密度,它也依赖于参数 $\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_p$,且依赖关系很复杂,在求极大似然估计时,通常都将它忽略.以 $p = 1$ 为例,上式的近似对数似然函数为

$$\begin{aligned} &l(\alpha_0, \alpha_1 \mid x_1, \cdots, x_n) \\ &\approx -\frac{n}{2}\log(2\pi) - \frac{1}{2}\sum_{t=2}^{n}\left(\log(\alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2) + \frac{x_t^2}{\alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2}\right), \end{aligned} \tag{6-14}$$

即使对上述的 $p = 1$ 情况,欲求对数似然函数的极值解也只能用数值计算方法求近似解.在实用中,可以用前面给出的最小二乘估计作为这种数值算法的初值,以迭代方法求近似解.

6.1.4 ARCH模型的预报问题

利用ARCH模型的平方模型式(6-12)或式(6-13),可以提出关于 $z_{n+1} = x_{n+1}^2$ 的预报问题,即

$$\begin{aligned} \widehat{z}_{n+1} &= E\{z_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots\} \\ &= E\{x_{n+1}^2 \mid x_n, x_{n-1}, \cdots\} \\ &= \alpha_0 + \alpha_1 x_n^2 + \cdots + \alpha_p x_{n-p+1}^2 \\ &= \mathrm{var}\{x_{n+1} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots\}. \end{aligned}$$

类似地,可以有两步和多步预报.例如,两步预报为

$$\begin{aligned} \widehat{z}_{n+1} &= E\{x_{n+2}^2 \mid x_n, x_{n-1}, \cdots\} \\ &= E(\alpha_0 + \alpha_1 x_{n+1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{n-p+2}^2 + \eta_{n+2} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots) \\ &= \alpha_0 + \alpha_1 \widehat{z}_{n+1} + \alpha_2 x_n^2 + \cdots + \alpha_p x_{n-p+2}^2 \end{aligned}$$

$$= \text{var}\{x_{n+2} \mid x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-p+1}\}.$$

对于一般情况,有

$$\hat{z}_{n+k} = \alpha_0 + \alpha_1 \hat{z}_{n+k-1} + \cdots + \alpha_p \hat{z}_{n-p+k} \qquad (k \geqslant 1). \tag{6-15}$$

由上式迭代计算 $\hat{z}_{n+k}$ 是很方便的. 由以上公式还可看到,式(6-15) 给出的 $\hat{z}_{n+k}$ 是在已知 $x_n, x_{n-1}, \cdots$ 时,对未来 x_{n+k} 的条件方差的预报. 这与第3章和第4章的条件期望预报的内容不同.

6.2　其他时变条件方差模型

6.2.1　GARCH 模型

由式(6-5) 可知,平稳序列的一步预报误差的条件方差是 $x_n, x_{n-1}, \cdots$ 的函数,而 ARCH 模型中的式(6-8) 只含有 $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-p+1}$,这使得 ARCH 模型有一定的局限性. 另一方面,在金融数学领域中的期权定价理论中,也提出了比 ARCH 模型更广的条件异方差模型. 这就是 **GARCH 模型**:

$$\begin{cases} x_t \mid X_{t-1} \sim N(0, h_t), & (6\text{-}16) \\ h_t = \alpha_0 + \alpha_1 x_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_p x_{t-p}^2 + \beta_1 h_{t-1} + \cdots + \beta_q h_{t-q}, & (6\text{-}17) \end{cases}$$

其中 $\alpha_0 > 0, \alpha_i \geqslant 0, \beta_i \geqslant 0$,而且

$$\sum_{i=1}^{p} \alpha_i + \sum_{j=1}^{q} \beta_j < 1. \tag{6-18}$$

关于此类模型的详细讨论可见文献[6].

6.2.2　随机条件异方差模型

在金融领域中,尤其是证券交易市场中,被观测序列的条件异方差性不能被上述模型很好地描述,但相对而言,可被如下的模型描述(先以低阶模型为例):

$$\begin{cases} x_t = \varepsilon_t e^{u_t}, & (6\text{-}19) \\ u_t = \beta u_{t-1} + \eta_t, & (6\text{-}20) \end{cases}$$

其中 $\{\varepsilon_t\}$ 和 $\{\eta_t\}$ 为两个相互独立的正态白噪声. 式(6-20) 是普通的一阶 AR 模型. 易见,

$$\begin{aligned} & E(x_t \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots) \\ & = E(\varepsilon_t \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots) E(e^{u_t} \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots) = 0. \end{aligned}$$

这说明 x_t 是新息序列. 其条件方差为

$$\begin{aligned} & \text{var}\{x_t \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots\} \\ & = E(x_t^2 \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots) \\ & = E(\varepsilon_t^2 \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots) E(e^{2u_t} \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots) \\ & = \sigma_\varepsilon^2 E(e^{2\beta u_{t-1} + 2\eta_t} \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots) \\ & = \sigma_\varepsilon^2 E e^{2\eta_t} \cdot E(e^{2\beta u_{t-1}} \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots) \end{aligned}$$

$$= cE(e^{2\beta u_{t-1}} \mid x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots), \tag{6-21}$$

其中 $\sigma_\varepsilon^2 = E\varepsilon_t^2, c = \sigma_\varepsilon^2 \cdot Ee^{2\eta_t}$. 对比式(6-10) 和式(6-19) 可知,式(6-10) 描述的条件异方差是被历史值 $x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots, x_{t-p}$ 唯一决定的,在此意义下,未加入新的随机性;而式(6-19) 描述的条件异方差有新的随机量 η_t 介入. 所以称之为**随机条件异方差模型**. 此模型的优点在于,其未知参数 β 不受非负的限制,这在统计估计时有方便之处. 但是,它给条件方差的计算带来了麻烦. 比较式(6-19)、式(6-20) 和式(6-21) 可知,模型式(6-19) 中的 ε_t 和 u_t 是不能直接观测的随机序列,只有 x_t 是可观测的;而在式(6-20) 中,右边的条件期望值是 $x_{t-1}, x_{t-2}, \cdots$ 的函数,但是没有明显表达式,这是此类模型的缺点. 虽然如此,它能刻画金融领域中的某些时变条件方差的特征.

6.2.3 时变条件方差 AR 模型

前几小节都限定讨论 x_t 为新息序列. 这是为了突出表现条件异方差的特征. 在实际应用中,很少直接观测到这样的新息序列. 因此,在使用 ARCH 或 GARCH 模型时,可以分两步进行:首先根据序列 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 进行第3章或第4章介绍的建模分析;然后得到拟合残差序列 $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \cdots, \hat{x}_n$,将它们视为上述的新息序列的样本序列,并拟合前述的 ARCH 或其他模型. 这只是一种实用方法. 同时也存在着另一种方法,即将条件均值和时变方差性写在同一模型中. 为了叙述简捷,先考虑线性条件均值情况,即

$$y_t = \beta_1 y_{t-1} + \cdots + \beta_p y_{t-p} + \varepsilon_t \sigma(y_{t-1}, \cdots, y_{t-q}), \tag{6-22}$$

其中 ε_t 为白噪声,而且 $E\varepsilon_t = 0, E\varepsilon_t^2 = 1$. 对比上式和式(3-7) 可知,在式(6-22) 中多了因子 $\sigma(y_{t-1}, \cdots, y_{t-q})$. 当它为常数时,式(6-22) 成为式(3-7);否则,式(6-22) 中的因子平方是 y_t 的条件方差值,具有时变性. 顺便指出,模型式(6-22) 右边的第二项比简单的白噪声假定合理,与更一般的新息序列相比,还是受到很强的人为假定限制. 但是这种限制对研究和统计上述模型起着重要作用.

容易看到,满足式(6-22) 的平稳解 y_t 的条件期望为

$$E(y_t \mid y_{t-1}, y_{t-2}, \cdots) = \beta_1 y_{t-1} + \beta_2 y_{t-2} + \cdots + \beta_p y_{t-p},$$

其条件方差为

$$\mathrm{var}(y_t \mid y_{t-1}, y_{t-2}, \cdots) = \sigma^2(y_{t-1}, y_{t-2}, \cdots, y_{t-q}).$$

比较简单的模型是如下的有限参数型:

$$\sigma^2(y_{t-1}, y_{t-2}, \cdots, y_{t-q}) = \alpha_0 + \alpha_1 y_{t-1}^2 + \cdots + \alpha_q y_{t-q}^2.$$

模型式(6-22) 的预报误差为

$$e_{n+1} = \varepsilon_{n+1} \sigma(y_n, y_{n-1}, \cdots, y_{n-q+1}).$$

形如式(6-22) 的模型还可以推广到带非线性自回归的情况:

$$y_t = \varphi(y_{t-1}, y_{t-2}, \cdots, y_{t-q}) + \varepsilon_t \sigma(y_{t-1}, y_{t-2}, \cdots, y_{t-q}).$$

在实际应用中,还应当考虑多元序列的条件异方差问题,这些还有待进一步研究.

参 考 文 献

1　陈兆国.时间序列及其谱分析.北京:科学出版社,1988.

2　安鸿志,顾岚.统计模型与预报方法.北京:气象出版社,1986.

3　安鸿志,陈敏.非线性时间序列分析.上海:上海科技出版社,1998.

4　Box G E P, Jenkins G M. Time series analysis, forecasting and control. New York: Holden Day, 1976.

5　Banergee A. et al. Cointergration, error correction, and the econometric analysis of nonstationary data. London: Oxford University, 1993.

6　Gourieroux C. ARCH models and financial applications. New York: Springer-Verlag, 1997.

7　Hall P, Heyde C C. Martingale limit theory and its application. New York: Academic Press, 1980.

8　Tong H. Nonlinear time series. London: Oxford University Press, 1990.

·随机数学卷·

第 14 篇

随机分析

编　者　巩馥洲　骆顺龙
审校者　严加安

目 录

引 言

诞生于20世纪50年代的随机分析是牛顿-莱布尼兹(Newton-Leibniz)微积分运算在随机(即不确定性)条件下的推广,其主要内容是研究随机过程(特别是鞅)泛函的微分和积分运算.经过半个世纪的发展,随机分析已成为一个重要且应用广泛的概率论分支,并已被成功地应用到诸如偏微分方程、调和分析、控制论、量子力学、金融数学等领域,也为工程技术中的数学模拟提供了重要的理论基础.随机分析方法还是研究支配复杂系统(即含有数目巨大的子系统或含有大量不确定因素的系统)的微观机制与其宏观行为之联系的有效工具.本篇力图给出该领域一个简明扼要的介绍,并指出目前比较活跃的若干研究方向.关于随机分析更广泛更一般的详细论述可参看何声武、汪嘉冈、严加安的著作[5]及池田信行(N. Ikeda)和渡边信三(S. Watanabe)的著作[6].关于随机分析的应用可参看舒斯(S. Schuss)的著作[15].

1 随机过程

1.1 一般概念

定义1 设$(\Omega,\mathscr{F},P)$为概率空间,T为一个集合,$(E,\mathscr{E})$为一个可测空间,则任何一个E值的随机变量族$\{X_t, t\in T\}$称为一个以T为指标集的**随机过程**,有时简称为过程.

其中Ω称为**样本空间**;E称为**状态空间**;T通常表示时间集,例如可取为$\{0,1,2,\cdots,n\}$,$\mathbf{N}$,$\mathbf{R}$,$\mathbf{R}^+=[0,+\infty)$等;X_t为指标t对应的状态.对于任意固定的$\omega\in\Omega$,从T到E的映照$t\dashrightarrow X_t(\omega)$称为**样本$\omega$的轨道**.当$E$为拓扑空间,$\mathscr{E}$为其博雷尔(A. Borel)$\sigma$代数时,若$\{X_t, t\in T\}$的几乎所有样本轨道在$T$也是拓扑空间时分别为左(或右)连续与连续,则分别称其为**左(或右)连续过程**与**连续过程**.

定义2 设$\{X_t, t\in T\}$为随机过程.若T还具有可测结构$\mathscr{T}$,且二元映照$(t,\omega)\to X_t(\omega)$关于$T\times\Omega$上乘积$\sigma$代数$\mathscr{T}\times\mathscr{F}$可测,则称$\{X_t, t\in T\}$为**可测过程**.显然,左(或右)连续随机过程和连续随机过程都是可测随机过程.

法国概率论学派把随机过程看成二元函数,并由此区分出一些特殊的二元可测类,使它们在随机积分理论中起重要作用.

定义3 概率空间$(\Omega,\mathscr{F},P)$上E值过程$\{X_t, t\in T\}$与另一个概率空间$(\Omega',\mathscr{F}',P')$上的$E$值过程$\{X'_t, t\in T\}$称为**互相等价**,如果它们具有相同的分布.即对

于任意 $n \in \mathbf{N}, t_1, t_2, \cdots, t_n \in T$，及 $A_1, A_2, \cdots, A_n \in \mathscr{E}$，有

$$P(X_{t_i} \in A_i, i = 1,2,\cdots,n) = P'(X'_{t_i} \in A_i, i = 1,2,\cdots,n).$$

另外，若 $\{X_t, t \in T\}$ 及 $\{X'_t, t \in T\}$ 是同一个概率空间上的两个 E 值可测过程，且它们的样本轨道几乎处处相同，即

$$P(X_t = X'_t, \forall t \in T) = 1,$$

则称它们为**无区别过程**．此时记为

$$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\} = \{X'_t, t \in \mathbf{R}^+\}.$$

定义 4　设 $(\Omega, \mathscr{F}, P)$ 为完备概率空间，$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathscr{F}$ 的一族完备子 σ 代数，使得

$$\mathscr{F}_s \subset \mathscr{F}_t \qquad (\forall s, t \in \mathbf{R}^+, s \leqslant t),$$

且

$$\mathscr{F}_t = \bigcap_{n \geqslant 1} \mathscr{F}_{t+\frac{1}{n}} \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+),$$

则称 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为满足通常条件的 **σ 代数流**，称 $(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$ 为**滤子概率空间(或精细概率空间)**．直观上，$\mathscr{F}_t$ 描述了直到时刻 t 的所有可测事件(即信息)．一般地，当指标集 T 具有全序结构时，可引入类似概念．

定义 5　给定滤子概率空间 $(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$ 以及其上的随机过程 $\{X_t, t \in T\}$．若对于任意 $t \in \mathbf{R}^+$ 随机变量 X_t 是 $\mathscr{F}_t$ 可测的，则称 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $(\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+)$ **适应的随机过程**．对于具有全序结构的指标集 T，可对过程 $\{X_t, t \in T\}$ 引入类似概念．

定义 6　设 $\{X_t, t \in T\}$ 为一个随机过程，T 具有全序结构．定义 $\mathscr{F}_t^0$ 为使得所有 $X_s (s \leqslant t)$ 可测的最小完备 σ 代数，令

$$\mathscr{F}_t = \bigcap_{n \geqslant 1} \mathscr{F}^0_{t+\frac{1}{n}},$$

则称 $\{\mathscr{F}_t, t \in T\}$ 为由过程 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 产生的完备自然 σ 代数流．显然，任何一个随机过程关于其完备自然 σ 代数流总是适应的．

定义 7　给定滤子概率空间 $(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$．称 $\Omega \times \mathbf{R}^+$ 上由集合 $(\mathscr{F}_0 \times \mathbf{R}^+) \cup \{A \times (t, +\infty) : \forall t \in \mathbf{R}^+, A \in \mathscr{F}_t\}$ 生成的 σ 代数为 $\Omega \times \mathbf{R}^+$ 上的**可料 σ 代数**．若一个随机过程作为 $\Omega \times \mathbf{R}^+$ 上的二元映照关于可料 σ 代数可测，则称其为**可料过程**．显然，左连续适应过程为可料过程．可料过程在随机积分理论中起很重要的作用．

1.2　几个重要的随机过程

1. 布朗运动

1826 年英国植物学家布朗(R. Brown)，首先在显微镜下观察到花粉在静水中会永不停歇地做不规则运动，人们称之为**布朗运动**．这种运动具有普遍的物理意义．1900 年法国人巴歇里埃(L. Bachelier) 在其博士论文《投机理论》中建立了布朗运动的基本理论，并将其应用于股票分析上．1905 年爱因斯坦(A. Einstein) 对布朗

运动作了物理解释和统计推导. 1923 年维纳(N. Wiener)构造了布朗运动的数学模型. 现在,布朗运动已成为描述随机现象的基石.

定义 8 概率空间$(\Omega,\mathscr{F},P)$上$\mathbf{R}^m$值随机过程$\{B_t,t\in\mathbf{R}^+\}$称为是从$x\in\mathbf{R}^m$出发的m维布朗运动,若:

1° $B_0=x$;

2° 对于任意$0\leqslant t_0<t_1<\cdots<t_n$,随机变量

$$B_{t_1}-B_{t_0},\cdots,B_{t_n}-B_{t_{n-1}}$$

相互独立,其中$n\in\mathbf{N}$任意;

3° 对于任意$0\leqslant s\leqslant t$,随机变量B_t-B_s是期望为零、方差为$(t-s)I_m$的m维正态随机变量,其中I_m为m阶单位矩阵.

布朗运动具有以下基本性质:

1° 时齐性 对于任意固定$s>0$,$\{B_{t+s}-B_s,t\in\mathbf{R}^+\}$是从$0\in\mathbf{R}^m$出发的布朗运动;

2° 对称性 $\{-B_t,t\in\mathbf{R}^+\}$为从$-x\in\mathbf{R}^m$出发的布朗运动;

3° 标度变换性质 对于任意$\lambda>0$,$\{\lambda B_{t/\lambda^2},t\in\mathbf{R}^+\}$为从$\lambda x\in\mathbf{R}^m$出发的布朗运动.

布朗运动的其他一些重要性质可参看文献[7].

2. 布朗桥

定义 9 $(\Omega,\mathscr{F},P)$上$\mathbf{R}^m$值连续过程$\{X_t,t\in[0,b]\}$称为从x出发到y的布朗桥,若它满足:

1° 对于任意$t_1,t_2,\cdots,t_n\in[0,b]$,$(X_{t_1},X_{t_2}\cdots,X_{t_n})$是正态的;

2° $E(X_t)=x+\dfrac{t}{b}(y-x)\qquad(\forall t\in[0,b])$;

3° $E(\langle X_t-E(X_t),X_s-E(X_s)\rangle_{\mathbf{R}^m})=s\wedge t-\dfrac{st}{b}\qquad(\forall s,t\in[0,b])$,

其中E表示期望;$\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathbf{R}^m}$表示$\mathbf{R}^m$中内积;$s\wedge t=\min\{s,t\}$.

若$\{B_t,t\in\mathbf{R}^+\}$为从x出发的布朗运动,则从x出发到达y的布朗桥$\{X_t,t\in[0,b]\}$之分布是过程$\{B_t,t\in[0,b]\}$在条件$B_b=y$下的条件分布,而且$X_0=x$,$X_b=y$. 这是称$\{X_t,t\in[0,b]\}$为布朗桥的原因.

3. 泊松过程

定义 10 概率空间$(\Omega,\mathscr{F},P)$上$\{0\}\cup\mathbf{N}$值过程$\{X_t,t\in\mathbf{R}^+\}$称为强度是$\lambda>0$的泊松(S.D.Poisson)过程,如果

1° $X_0=0$;

2° 对于任意$0\leqslant t_0\leqslant t_1<\cdots<t_n,n\in\mathbf{N}$,随机变量

$$X_{t_1}-X_{t_0},X_{t_2}-X_{t_1},\cdots,X_{t_n}-X_{t_{n-1}}$$

相互独立;

3° 对于任意$0\leqslant s\leqslant t$,随机变量X_t-X_s具有参数为$\lambda(t-s)$的泊松分布,即

$$P\{X_t-X_s=k\}=\frac{\lambda^k(t-s)^k}{k!}\exp(-\lambda(t-s))\qquad(k=0,1,2,\cdots).$$

泊松过程与布朗运动具有同等重要性，只是侧重点不同．事实上，从抽象的观点看，可以在基于布朗运动的分析与基于泊松过程的分析之间建立一个自然的同构映射．

4. 高斯过程

定义 11 $\mathbf{R}^m$ 值过程$\{X_t, t\in T\}$称为**高斯**(G.F.Gauss)**过程**，如果对于任意 $n\in\mathbf{N}$ 及 $t_1,t_2,\cdots,t_n\in T$，随机向量$(X_{t_1},X_{t_2},\cdots,X_{t_n})$是正态随机向量．显然，布朗运动和布朗桥都是高斯过程．

5. 平稳独立增量过程

定义 12 $\mathbf{R}^m$ 值过程$\{X_t, t\in\mathbf{R}^+\}$称为**独立增量过程**，如果对于任意 $n\in\mathbf{N}$ 及 $0\leqslant t_0<t_1<\cdots<t_n$，随机变量

$$X_{t_1}-X_{t_0}, X_{t_2}-X_{t_1},\cdots,X_{t_n}-X_{t_{n-1}}$$

相互独立．若进一步还有：对于任意 $0\leqslant s<t$，随机变量 X_t-X_s 的分布仅依赖于 $t-s$，则称$\{X_t,t\in\mathbf{R}^+\}$为**平稳独立增量过程**．当平稳独立增量过程是随机连续过程，即 $t\to b$ 时，X_t 几乎处处收敛于 X_b，$\forall b\in\mathbf{R}^+$，则称$\{X_t,t\in\mathbf{R}^+\}$为**莱维**(Lévy)**过程**．

6. 马尔可夫过程

定义 13 设$\{X_t,t\in\mathbf{R}^+\}$是$(\Omega,\mathscr{F},P)$上 E 值过程．令

$$\begin{cases}\mathscr{F}_{\leqslant t}=\sigma\{X_s:s\leqslant t\},\\ \mathscr{F}_{=t}=\sigma\{X_t\},\\ \mathscr{F}_{\geqslant t}=\sigma\{X_s:s\geqslant t\}.\end{cases}$$

如果对于任意 $t\in\mathbf{R}^+$，$A\in\mathscr{F}_{\leqslant t}$，及 $B\in\mathscr{F}_{\geqslant t}$，有

$$P(AB\mid\mathscr{F}_{=t})=P(A\mid\mathscr{F}_{=t})P(B\mid\mathscr{F}_{=t}),$$

则称$\{X_t,t\in\mathbf{R}^+\}$为**马尔可夫**(A.A.Markov)**过程**，**简称马氏过程**．直观上，马氏过程的过去与将来关于现在是条件独立的．当 T 有全序结构时，可有类似定义．

7. 有限变差(可积变差，增)过程

设$\{X_t,t\in\mathbf{R}^+\}$为一个 $\mathbf{R}$ 值过程，如果它的几乎所有样本轨道都是有限变差(可积变差，增)函数，则称其为有**限变差**(**可积变差，增**)**过程**．

8. 鞅

这类随机过程在随机分析中扮演着中心角色，将在下章详细介绍．

2 鞅与半鞅

2.1 概 念

定义 1 设$(\Omega,\mathscr{F},P)$为概率空间，$(T,\leqslant)$为全序集，$\{\mathscr{F}_t,t\in\mathbf{R}^+\}$为满足通常条件的 σ 代数流，则 $\mathbf{R}^m$ 值过程$\{X_t,t\in T\}$称为$\{\mathscr{F}_t,t\in T\}$**鞅**，如果

1° 对于任意 $t \in T$, X_t 关于 $\mathscr{F}_t$ 可测,且关于 P 可积;

2° 对于任意 $s \leqslant t$,有

$$E(X_t \mid \mathscr{F}_s) = X_s \qquad (\text{a.s.}).$$

当 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 是 $\mathbf{R}$ 值过程时,可将上述条件 2° 改为条件 3°.

3° 对于任意 $s \leqslant t$,有

$$E(X_t \mid \mathscr{F}_s) \leqslant X_s (\text{或} \geqslant X_s) \qquad (\text{a.s.}),$$

若 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 满足条件 1° 及 3° 则称 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ **上鞅或下鞅**. 有时为方便,可不指明其相应 σ 代数流.

从概率论角度看,鞅(上鞅,下鞅)分别是常函数(单调减函数,单调增函数)的随机推广,可作为赌徒参与公平(劣势、优势)赌博财富过程的数学模型,也可作为更广泛的博弈过程中支付过程的数学模型.

以下是一些常见鞅的例子.

例 1 设 $(\Omega, \mathscr{F}, P)$ 为概率空间, $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为满足通常条件的 σ 代数流,而 X 为一个可积随机变量. 对于任意 $t \in \mathbf{R}^+$,定义

$$X_t = E(X \mid \mathscr{F}_t) \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

则 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 是 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 鞅.

例 2 设 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n, \cdots$ 是一列均值为零的可积独立随机变量序列,定义

$$X_n = \sum_{k=1}^{n} \xi_k \qquad (\forall n \in \mathbf{N}),$$

则 $\{X_n, n \in \mathbf{N}\}$ 为 $\{\mathscr{F}_n, n \in \mathbf{N}\}$ 鞅,其中 $\{\mathscr{F}_n, n \in \mathbf{N}\}$ 为其完备自然 σ 代数流.

例 3 设 $\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 是 m 维布朗运动, h 为 $\mathbf{R}^m$ 上实值函数. 令

$$X_t = h(B_t) \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+),$$

则在一定的可积性条件下,有下述结论:

1° 若 h 是调和函数,则 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 关于其完备自然 σ 代数流为鞅;

2° 若 h 是上(或下)调和函数,则 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 关于其完备自然 σ 代数流为上(或下)鞅.

例 4 设 $(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$ 为滤子概率空间, $\{\widetilde{B}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为其上适应的 $\mathbf{R}^m$ 值过程. 若 $\{\widetilde{B}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 满足对于任意 $\lambda \in \mathbf{R}^m$, $t > s \geqslant 0$,恒有

$$E\left(\exp(\sqrt{-1}\langle \lambda, \widetilde{B}_t - \widetilde{B}_s \rangle_{\mathbf{R}^m}) \mid \mathscr{F}_s\right) = \exp\left(-\frac{1}{2} \| \lambda \|_{\mathbf{R}^m}^2 (t-s)\right) \quad (\text{a.s.}),$$

则称 $\{\widetilde{B}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 是初值为 $\widetilde{B}_0$ 的 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 布朗运动. 特别当 $\widetilde{B}_0 = 0$ 时,简称其为 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 布朗运动. 其中 $\| \cdot \|_{\mathbf{R}^m}$ 表示 $\mathbf{R}^m$ 中的欧氏范数.

(1) 其中要注意的是:若令 $\{\mathscr{F}_t^{\widetilde{B}}, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\{\widetilde{B}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 的完备自然 σ 代数流,则 $\mathscr{F}_t^{\widetilde{B}} \subset \mathscr{F}_t$, $\forall t \in \mathbf{R}^+$,且 $\{\widetilde{B}_t - \widetilde{B}_0, t \in \mathbf{R}^+\}$ 是本篇 1.2 节中定义 8 意义下由 $0 \in \mathbf{R}^m$ 出发的布朗运动.

(2) $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 布朗运动比 1.2 中定义 8 意义下的布朗运动要稍微广泛一

点．显然，在1.2节中定义8意义下的布朗运动$\{B_t\}$，关于其完备自然σ代数流$\{\mathscr{F}_t^B, t \in \mathbf{R}^+\}$为$\{\mathscr{F}_t^B, t \in \mathbf{R}^+\}$布朗运动．

(3) 可以验证，$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$布朗运动是$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$鞅．

例5 设$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为独立增量过程，且对于一切$t \in \mathbf{R}^+$有$E(|X_t|) < +\infty$，则$\{X_t - E(X_t), t \in \mathbf{R}^+\}$关于其完备自然$\sigma$代数流为鞅．若还有

$$E((X_t - E(X_t))^2) < +\infty \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+),$$

则$\{(X_t - E(X_t))^2 - E((X_t - E(X_t))^2), t \in \mathbf{R}^+\}$为鞅．

例6 设$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$是强度为$\lambda$的泊松过程，则$\{X_t - \lambda_t, t \in \mathbf{R}^+\}$关于其完备自然$\sigma$代数流为鞅．

例7 鞅变换．

设$(\Omega, (\mathscr{F}_n, n \in \mathbf{N}), \mathscr{F}, P)$为滤子概率空间，$\{V_n, n \in \mathbf{N}\}$为其上的可料过程(即$V_1$是$\mathscr{F}_1$可测的，而$V_n$是$\mathscr{F}_{n-1}$可测的$(\forall n > 1, n \in \mathbf{N})$)，而$\{X_n, n \in \mathbf{N}\}$为$\{\mathscr{F}_n, n \in \mathbf{N}\}$鞅．定义

$$V_n^X = \sum_{k=2}^{n} V_n(X_n - X_{n-1}) + V_1 X_1 \qquad (\forall n \in \mathbf{N}),$$

则称过程$\{V_n^X, n \in \mathbf{N}\}$为$\{X_n, n \in \mathbf{N}\}$关于$\{V_n, n \in \mathbf{N}\}$的**鞅变换**．特别地，当对于任意$n \in \mathbf{N}$, V_n^X可积时，$\{V_n^X, n \in \mathbf{N}\}$是$\{\mathscr{F}_n, n \in \mathbf{N}\}$鞅．

这个例子是关于鞅的随机积分在离散情形的形式．

下面进一步引入停时、局部鞅、半鞅等概念．

定义2 给定概率空间$(\Omega, \mathscr{F}, P)$及满足通常条件的σ代数流$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$．设$\tau$为取值于$\mathbf{R}^+$的随机变量．若对于任意$t \in \mathbf{R}^+$，有$\{\tau \leqslant t\} \in \mathscr{F}_t$，则称$\tau$为$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$**停时**．此时，集合

$$\mathscr{F}_\tau = \{A \in \sigma(\bigcup_{t \in \mathbf{R}^+} \mathscr{F}_t) : A \cap \{\tau \leqslant t\} \in \mathscr{F}_t, \forall t \in \mathbf{R}^+\}$$

组成$\mathscr{F}$的子σ代数．称$\mathscr{F}_\tau$为**停时τ的前事件σ代数**．

定义3 设$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为滤子概率空间$(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$上适应可测过程．如果存在停时列$\{\tau_n, n \in \mathbf{N}\}$，使得：

1° $\tau_n \uparrow +\infty \qquad (\text{a.s.}, n \to +\infty)$;

2° 对于任意$n \in \mathbf{N}$，停时过程$\{M_{\tau_n \wedge t}, t \in \mathbf{R}^+\}$为$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$鞅，

则称$\{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$**局部鞅**．

如果$\{V_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为实值过程，且存在满足上述条件1°的停时列$\{\tau_n, n \in \mathbf{N}\}$，使得$\{V_{\tau_n \wedge t}, t \in \mathbf{R}^+\}$为有限变差过程$(\forall n \in \mathbf{N})$，则称$\{V_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为**局部有限变差过程**．

一般地，当对某类过程加上限定词“局部”时，其含义与上述的定义3所述类似．

定义4 设$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为滤子概率空间$(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$上的适应可测过程，且有分解

$$X_t = M_t + V_t \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

其中$\{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$局部鞅；$\{V_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$局部有限变差过程，则称$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$半鞅．

2.2　基本性质

定理 1　如果$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为鞅，$\varphi$是凸函数，且$E(|\varphi(X_t)|) < +\infty, \forall t \in \mathbf{R}^+$，则$\{\varphi(X_t), t \in \mathbf{R}^+\}$为下鞅．

定理 2　(杜布(J.L.Doob)停时定理)　设$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为鞅，$\sigma, \tau$为两个有界停时，$\sigma \leqslant \tau$，则$X_\sigma$和$X_\tau$均可积，且

$$E(X_\tau \mid \mathscr{F}_\sigma) = X_\sigma \qquad (\text{a.s.}).$$

众所周知，单调有界序列必收敛．下面是该结论的一个随机推广．

定理 3　如果$\{X_n, n \in \mathbf{N}\}$为一个上鞅，且$\sup\limits_{n \in \mathbf{N}} E(|X_n|) < +\infty$，则当$n \to +\infty$时，$X_n$几乎处处收敛于一个可积随机变量．若$\{X_n, n \in \mathbf{N}\}$一致可积，则存在一个可积随机变量$X_\infty$，满足：

1° $X_n \xrightarrow{\text{a.s.}, L^1} X_\infty \qquad (n \to +\infty)$，

其中$X_n \xrightarrow{L^1} X_\infty$表示$E|X_n - X_\infty| \to 0, n \to +\infty$；

2° $E(X_\infty \mid \mathscr{F}_n) \leqslant X_n \qquad (\text{a.s.})$.

定理 4　(杜布极大不等式)　设$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$是一个连续鞅，$E(X_0) = 0$，则对于任意$0 < T < +\infty, \varepsilon > 0$，有

$$P\left(\left\{\omega: \sup_{0 \leqslant t \leqslant T} |X_t(\omega)| \geqslant \varepsilon\right\}\right) \leqslant \frac{1}{\varepsilon^2} E(X_T^2).$$

定理 5　(杜布上穿不等式)　设$\{X_n, n \in \mathbf{N}\}$为下鞅，$a < b$．定义

$N_a^b(k) = \sup\{j \in \mathbf{N}$：存在$m_1 < n_1 < \cdots < m_j < n_j \leqslant k$，使$X_{m_i} = a$及$X_{n_i} = b, i = 1, 2, \cdots, j\}$，

则

$$E(N_a^b(k)) \leqslant \frac{E((X_k - a)^+)}{b - a} \qquad (\forall k \in \mathbf{N}).$$

定理 6　如果$\{M_t, t \in [0, T]\}$为连续鞅，$0 < T < +\infty$，则

$$E\left(\sup_{0 \leqslant t \leqslant T} |M_t|^2\right) \leqslant 4E(|M_T|^2).$$

定理 7　(杜布-梅叶尔(Doob-Meyer)分解定理)　设$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为右连续一致可积上鞅，则$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$有如下唯一分解：

$$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\} = \{M_t - A_t, t \in \mathbf{R}^+\},$$

其中$\{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为零初值鞅；$\{A_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为可料增过程．

定理 8　如果$\{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$是一个可料鞅，同时也是可积变差过程，则

$$P(\{\omega: M_t^{(\omega)} = M_0^{(\omega)}, \forall t \in \mathbf{R}^+\}) = 1.$$

定理 9 （伯克哈尔特 - 戴维斯 - 冈迪(Burkhalder-Davis-Gundy) 不等式） 设 $\Phi:[0,+\infty]\to[0,+\infty]$ 为非减凸函数，

$$\Phi(0)=0,$$

$$\Phi(+\infty)=\Phi(-\infty)\equiv\lim_{\lambda\uparrow+\infty}\Phi(\lambda),$$

$$\Phi(2\lambda)\leqslant c\Phi(\lambda)\qquad(\forall\lambda\in[0,+\infty),c\in[0,+\infty)),$$

则存在常数 $0<A<B<+\infty$，使得对于任何鞅 $\{X_n,n\in\mathbf{N}\}$，成立

$$AE\left(\Phi\left(\left(\sum_{n=2}^{+\infty}(X_n-X_{n-1})^2+X_1^2\right)^{\frac{1}{2}}\right)\right)$$

$$\leqslant E\left(\Phi\left(\sup_{n\geqslant1}|X_n|\right)\right)\leqslant BE\left(\Phi\left(\left(\sum_{n=2}^{+\infty}(X_n-X_{n-1})^2+X_1^2\right)^{\frac{1}{2}}\right)\right).$$

定理 10 设 $\{M_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 为连续局部鞅，$M_0=0$，则在无区别意义下，存在唯一适应连续增过程 $\{[M]_t,t\in\mathbf{R}^+\}$，使 $\{|M_t|^2-[M]_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 为连续局部鞅，且 $[M]_0=0$. 一般称 $\{[M]_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 为 $\{M_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 的**二次变差过程**.

若 $\{M_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 与 $\{N_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 均为连续局部鞅，则称

$$\{[M,N]_t,t\in\mathbf{R}^+\}\equiv\left\{\frac{1}{4}([M+N]_t-[M-N]_t),t\in\mathbf{R}^+\right\}$$

为 $\{M_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 与 $\{N_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 的**互变差过程**，它是适应有限变差过程.

定理 11 设 $\{M_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 和 $\{N_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 均为连续局部鞅，对于任意 $t\in\mathbf{R}^+$，$\{\pi_t^n:n\in\mathbf{N}\}$ 为 $[0,t]$ 的一列分划，使得

$$\lim_{n\to\infty}\delta\pi_t^n=0,$$

其中 $\delta\pi_t^n$ 为**分划 π_t^n 的步长**，即分划中相邻点距离的最大值，则当 $n\to+\infty$ 时，在依概率收敛意义下，有

$$\sum_{j\in\pi_t^n}(M_{t_{j+1}}-M_{t_j})(N_{t_{j+1}}-N_{t_j})\longrightarrow[M,N]_t\qquad(\forall t\in\mathbf{R}^+).$$

定理 12 （随机时刻变换） 设 $\{M_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 为一个连续局部鞅，$M_0=0$，$[M]_t\uparrow+\infty(t\to+\infty)$. 对于任意 $t\geqslant0$，定义停时 τ_t 及 $\mathscr{Y}_t$ 分别为

$$\tau_t=\inf\{u\in[0,+\infty):[M]_u>t\},$$

$$\mathscr{Y}_t=\mathscr{F}_{\tau_t},$$

则 $\{B_t\equiv M_{\tau_t},t\in\mathbf{R}^+\}$ 关于 $\{\mathscr{Y}_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 为布朗运动，且

$$\{M_t,t\in\mathbf{R}^+\}=\{B_{[M]_t},t\in\mathbf{R}^+\}.$$

特别地，$\{M_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 为 $\{\mathscr{F}_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 布朗运动，当且仅当

$$P\{\omega:[M]_t(\omega)=t,\forall t\in\mathbf{R}^+\}=1.$$

后一结论通常称为**布朗运动的局部鞅刻画**或**布朗运动的莱维特征刻画**.

定理 3、定理 5、定理 9 对右连续鞅有类似结论，可参看文献[5,11].

3 随机积分

3.1 维纳积分

设$\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为滤子概率空间$(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$上$\mathbf{R}^m$值$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$布朗运动.对于$f \in L^2(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^m)$,如果$f$为简单函数,即$f$可表示为

$$f(t) = \sum_{i=0}^{n} a_i I_{[t_i, t_{i+1}]}(t) \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+),$$

其中$a_i \in \mathbf{R}^m$;$I_{[t_i, t_{i+1}]}$为$[t_i, t_{i+1})$的示性函数,$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{n+1} < +\infty$,则定义

$$\int_{\mathbf{R}^+} f(t) \mathrm{d}B_t = \sum_{i=0}^{n} \langle a_i, (B_{t_{i+1}} - B_{t_i}) \rangle_{\mathbf{R}^m}.$$

显然,此时有

1° $\int_{\mathbf{R}^+} f(t) \mathrm{d}B_t$为随机变量;

2° $E\left(\int_{\mathbf{R}^+} f(t) \mathrm{d}B_t\right) = 0; E\left(\left(\int_{\mathbf{R}^+} f(t) \mathrm{d}B_t\right)^2\right) = \int_{\mathbf{R}^+} |f(t)|^2_{\mathbf{R}^m} \mathrm{d}t.$

因此,$f \dashrightarrow \int_{\mathbf{R}^+} f(t) dB_t$是从$L^2(\mathbf{R}^+)$中简单函数集合到$L^2(\Omega, \mathscr{F}, P)$中的线性等距映照.由于简单函数组成的线性空间是$L^2(\mathbf{R}^+)$中依$L^2$拓扑稠密的线性子空间,所以该映照可等距延拓到$L^2(\mathbf{R}^+)$上.对于任意的$f \in L^2(\mathbf{R}^+)$,用$\int_{\mathbf{R}^+} f(t) \mathrm{d}B_t$来表示该映照下$f$在$L^2(\Omega, \mathscr{F}, P)$中的像,并称其为$f$的维纳积分.一般地,$\int_0^t f(t) \mathrm{d}B_t$代表$\int_{\mathbf{R}^+} f(s) I_{[0,t]}(s) \mathrm{d}B_s$.

3.2 伊藤积分

维纳积分$\int_0^t f(s) \mathrm{d}B_s$中的被积函数$f$是与样本$\omega \in \Omega$无关的函数.伊藤(K. Itô)首次定义了被积函数是随机过程的随机积分.

设$(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$为滤子概率空间,$\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为其上的$\mathbf{R}^m$值$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$布朗运动.对于任何$T > 0$,对满足

$$E\left(\int_0^T |H_t|^2_{\mathbf{R}^m} \mathrm{d}t\right) < +\infty \tag{3-1}$$

的 $\mathbf{R}^m$ 值 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 适应可测过程，定义随机积分

$$I_T(H) = \int_0^T H_t \mathrm{d}B_t,$$

并称其为 $\{H_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 关于 $\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 的**伊藤随机积分**，简称**伊藤积分**．

用 L_T^2 表示在 $[0, T]$ 上满足条件式(3-1)的 $\{\mathscr{F}_t, t \in [0, T]\}$ 适应过程全体，并以 S_T^2 表示 L_T^2 中如下简单过程全体：

$$H_t = h_0 + \sum_{k=1}^{n} h_k I_{[t_k, t_{k+1})}(t) \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+),$$

其中 $0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{n+1} = T, n \in \mathbf{N}; h_i$ 关于 $\mathscr{F}_{t_i}$ 可测$(i = 1, 2, \cdots, n)$；h_0 关于 $\mathscr{F}_0$ 可测．

对于如上所述的 H，定义

$$I_T(H) = \langle h_0, B_0 \rangle_{\mathbf{R}^m} + \sum_{k=1}^{n} \langle h_k, B_{t_{k+1}} - B_{t_k} \rangle_{\mathbf{R}^m},$$

则

1° $E(I_T(H)) = 0 \qquad (\forall H \in S_T^2)$;

2° $E((I_T(H))^2) = E\left(\int_0^T |H_t|_{\mathbf{R}^m}^2 \mathrm{d}t\right) \qquad (\forall H \in S_T^2)$.

显然，当 L_T^2 赋予范数

$$\| H \|_T = \left\{ E\left(\int_0^T |H_t|_{\mathbf{R}^m}^2 \mathrm{d}t\right) \right\}^{\frac{1}{2}} \qquad (\forall H \in L_T^2)$$

时，$(L_T^2, \| \cdot \|_T)$ 为希尔伯特(D. Hilbert)空间，而且 I_T 作为 $S_T^2 \subset L_T^2$ 内到 $L^2(\Omega, \mathscr{F}_T, P)$ 的线性算子为等距映射．由于 S_T^2 是 $(L_T^2, \| \cdot \|_T)$ 中的稠密线性子空间，因而 I_T 可连续延拓为 L_T^2 到 $L^2(\Omega, \mathscr{F}_T, P)$ 的等距同构，使上述的1°，2°对于任何 $H \in L_T^2$ 成立．记 $H \in L_T^2$ 在 I_T 下的像为 $\int_0^T H_t \mathrm{d}B_t$．这就是所谓的 $\{H_t, t \in [0, T]\}$ 关于 $\{B_t, t \in [0, T]\}$ 的伊藤随机积分．一般地，若 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 适应可测过程 $\{H_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 满足

$$\{H_t, t \in [0, T]\} \in L_T^2 \qquad (\forall T \in [0, +\infty)),$$

则记

$$I(H) = \left\{ \int_0^T H_t \mathrm{d}B_t, T \in [0, +\infty) \right\},$$

并称 $I(H)$ 为 $\{H_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 关于 $\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 的伊藤(不定)积分．有时也记 $I(H)$ 为 $H.B$. 显然，维纳积分是伊藤积分的特例．

例1 设 $\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}$ 值布朗运动，则当 $B_0 = 0$ 时，有

$$\int_0^t B_s \mathrm{d}B_s = \frac{1}{2}(B_t^2 - t) \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

例2 伊藤多重积分

$$\int \cdots \int_{0 \leqslant u_1 \leqslant u_2 \leqslant \cdots \leqslant u_n \leqslant t} \left\{ \int \mathrm{d}B_{u_1} \right\} \mathrm{d}B_{u_2} \cdots \mathrm{d}B_{u_n} = \frac{1}{n!} t^{n/2} h_n\left(\frac{B_t}{\sqrt{t}}\right),$$

其中 $t \in \mathbf{R}^+$；h_n 是 n 阶埃尔米特(C. Hermite) 多项式

$$h_n(x) = (-1)^n \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \qquad (n = 0,1,2,\cdots),$$

而 $\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}$ 值布朗运动．

3.3 局部鞅和半鞅的积分

为了定义局部鞅和半鞅的随机积分，先引入随机过程关于有限变差过程的**勒贝格 - 斯蒂尔切斯(Lebesgue-Stieltjes) 积分**．

定义 1 设 $\{Y_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^m$ 值随机过程，$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为有限变差的 $\mathbf{R}^m$ 值过程，若对于任意 $T \in [0, +\infty)$，$\{Y_t, t \in [0, T]\}$ 满足：对于几乎所有样本 $\omega \in \Omega$，

$$\int_0^T \langle Y_t(\omega), \mathrm{d}X_t(\omega)\rangle_{\mathbf{R}^m}$$

在勒贝格 - 斯蒂尔切斯积分意义下存在，则称 $\{Y_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 关于 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 是勒贝格 - 斯蒂尔切斯可积的，并记

$$Y. X = \left\{\int_0^t \langle Y_s, \mathrm{d}X_s\rangle, t \in \mathbf{R}^+\right\}.$$

称 $Y. X$ 为 $\{Y_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 关于 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 的勒贝格 - 斯蒂尔切斯(不定) 积分．

设 $M = \{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 及 $L = \{L_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为连续局部鞅，那么它们的互变差过程为适应有限变差过程．这样，可引入如下关于**局部鞅的积分**．

定义 2 设 $M = \{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为零初值连续局部鞅，H 为可料过程．若存在(唯一的) 连续局部鞅 $H. M$，使得对于任何连续局部鞅 $L = \{L_t, t \in \mathbf{R}^+\}$，有

$$\{[H. M, L]_t, t \in \mathbf{R}^+\} = H. [M, L],$$

则称 $H. M$ 为 H 关于 M 的随机积分，其中 $[M, L] = \{[M, L]_t, t \in \mathbf{R}^+\}$．有时记 $H. M$ 为 $\int H \mathrm{d}M$，记 $\int H I_{[0,t]} \mathrm{d}M$ 为 $\int_0^t H_s \mathrm{d}M_s$．

下面给出关于局部鞅积分的基本性质及主要定理．

定理 1 设 $M = \{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为零初值连续局部鞅，$H = \{H_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为可料过程，则 H 关于 M 可积，当且仅当过程

$$\sqrt{|H|^2. [M]} = \left\{\left(\int_0^t |H_s|^2 \mathrm{d}[M]_s\right)^{\frac{1}{2}}, t \in \mathbf{R}^+\right\}$$

为局部可积增过程．

定理 2 设 M 为零初值连续局部鞅，H 和 K 为可料过程，则当 H 和 K 关于 M 可积时，

1° $H + K$ 关于 M 可积，且

$$(H + K). M = H. M + K. M;$$

2° H 关于 $K. M$ 可积时，有

$$H. (K. M) = (HK). M,$$

其中 $HK = \{\langle H_t, K_t\rangle_{\mathbf{R}^m}, t \in \mathbf{R}^+\}$，而且 H 关于 $K. M$ 可积，当且仅当 HK 关于 M 可

积；

3° 设 τ 为一个停时，则

$$\{(H.M)_{t\wedge\tau}, t\in\mathbf{R}^+\} = H.\{M_{t\wedge\tau}, t\in\mathbf{R}^+\}.$$

定义 3　设 M 为零初值连续局部鞅，H 为适应可测过程．假设存在一个连续增函数 $a=\{a_t, t\in\mathbf{R}^+\}$，使得对于几乎所有 $\omega\in\Omega$，$d[M].(\omega)$ 关于 da 绝对连续，其中 $d[M].(\omega)$ 及 da 分别表示 $\{M_t(\omega), t\in\mathbf{R}^+\}$ 及 $\{a_t, t\in\mathbf{R}^+\}$ 生成的 $\mathbf{R}^+$ 上测度，那么当过程

$$H^2.[M] = \left\{\int_0^t |H_s|^2 d[M]_s, t\in\mathbf{R}^+\right\}$$

为适应增过程时，存在唯一连续局部鞅 $H.M$，使得对于任何连续局部鞅 L，有

$$[H.M, L] = H.[M, L].$$

此时，称 $H.M$ 为 H 关于 M 的随机积分．它推广了 3.2 节中的伊藤积分，是适应可测过程关于局部鞅的积分．

设 $H=\{H_t, t\in\mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^m$ 值可测过程，$\{\mathscr{F}_t, t\in\mathbf{R}^+\}$ 为满足通常条件的 σ 代数流．若对于任意 $T\in(0,+\infty)$，当 $[0,T]$ 上的 σ 代数为其博雷尔 σ 代数 $\mathscr{B}_T$ 时，过程 $\{H_t, t\in[0,T]\}$ 为 $(\Omega\times[0,T], \mathscr{F}_T\times\mathscr{B}_T)$ 可测过程，则称 H 为**循序可测过程**．显然，循序可测过程为适应可测过程．对循序可测过程可以引入它关于一般连续局部鞅的积分．

定义 4　设 M 为零初值连续局部鞅，H 为循序可测过程，当过程

$$H^2.[M] = \left\{\int_0^t |H_s|^2 d[M_s], t\in\mathbf{R}^+\right\}$$

为适应增过程时，存在唯一连续局部鞅 $H.M$，使得对于任何连续局部鞅 L，成立

$$[H.M, L] = H.[M, L],$$

称 $H.M$ 为 H 关于 M 的随机积分．它就是循序可测过程关于局部鞅的积分．

这里应注意：

(1) 循序可测过程和适应可测过程关于局部鞅的积分与可料过程关于局部鞅的积分具有类似基本性质；

(2) 若 M 不是零初值连续局部鞅，则定义过程 H 关于 M 的随机积分为

$$H.M = \langle H_0, M_0\rangle_{\mathbf{R}^m} + H.(M-M_0);$$

(3) 对于不必连续的局部鞅，通过将其跳之和引入它的二次变差过程以及互变差过程，并将本节中定义 2、定义 3、及定义 4 中 L 换成一般局部鞅，则可引入一般局部鞅的随机积分，详见文献[5].

由于关于局部鞅的随机积分与通常的积分有本质差别，为了把通常积分包含在随机分析中的积分理论中，下面引入半鞅的随机积分．

定义 5　设 $X=\{X_t, t\in\mathbf{R}^+\}$ 为连续半鞅，具有分解式：

$$X = M + A,$$

其中 M 为连续局部鞅；A 为适应有限变差过程．如果 H 为可料过程，满足：

1° H 关于 M 可积；

2° H 关于 A 是勒贝格 - 斯蒂尔切斯可积的，

则称 H 关于 X 可积,并记其随机积分为

$$H.X = H.M + H.A,$$

称之为半鞅的随机积分.

有时也记 $H.X$ 为 $\int H\mathrm{d}M$,记 $\int HI_{[0,t]}\mathrm{d}M$ 为 $\int_0^t H\mathrm{d}M$.

半鞅的随机积分具有如下性质.

定理 3 设 X 和 Y 为连续半鞅,H 为可料过程,则:

1° 若 H 关于 X 与 Y 分别可积,则 H 关于 $X+Y$ 也可积,而且

$$H.(X+Y) = H.X + H.Y;$$

2° 若 H 关于 X 可积,τ 为任何一个停时,那么

$$\{(H.X)_{t\wedge\tau}, t\in\mathbf{R}^+\} = H.\{X_{t\wedge\tau}, t\in\mathbf{R}^+\};$$

3° 若 K 为另外一个可料过程,$|K|\leqslant|H|$,而 H 关于 X 可积,则 K 关于 X 可积;

4° 若定义连续半鞅的二次变差过程为其分解中连续局部鞅的二次变差过程,并按类似连续局部鞅的方式引入连续半鞅的互变差,那么当 H 关于 X 可积时,有

$$[H.X, Y] = H.[X, Y];$$

5° 若两个可料过程 H 和 K 均关于 X 可积,则 $H+K$ 关于 X 也可积,而且

$$(H+K).X = H.X + K.X,$$

若 K 关于 $H.X$ 可积,则当且仅当

$$KH = \{\langle K_t, H_t\rangle_{\mathbf{R}^m}, t\in\mathbf{R}^+\}$$

关于 X 可积时,

$$K.(H.X) = KH.X;$$

6° 若存在停时列 $\tau_n\uparrow+\infty$,使得对于每一个 $n\in\mathbf{N}$,有 H 关于 $\{X_{t\wedge\tau_n}, t\in\mathbf{R}^+\}$ 可积,则 H 关于 X 可积.

关于半鞅随机积分有如下的基本定理.

定理 4 设 X 为连续半鞅,τ 为有限停时,$H^{(n)}(n\geqslant1)$ 及 H 为局部有界可料过程.如果对于几乎所有 $\omega\in B\in\mathscr{F}$,在$[0,\tau(\omega)]$上$\{H^{(n)}.(\omega)\}_{n\geqslant1}$ 一致有界且收敛于 $H.(\omega)$,则在依概率收敛意义下,

$$I_B\sup_{t\leqslant\tau}|(H^{(n)}.X)_t - (H.X)_t| \longrightarrow 0 \qquad (n\to\infty),$$

其中 I_B 为 B 的示性函数.

定理 5 设 X 为连续半鞅,可料过程 H 关于 X 可积,$K^{(n)}(n\geqslant1)$ 及 K 为可料过程,满足:

1° $|K^{(n)}|\leqslant|H|$,$|K|\leqslant|H|$;

2° 对于某一个有限停时 τ 及几乎所有 $\omega\in B\in\mathscr{F}$ 有

$$\lim_{n\to\infty}K_t^{(n)}(\omega) = K_t(\omega) \qquad (\forall\, t\in[0,\tau(\omega)]),$$

则在依概率收敛意义下,

$$I_B\sup_{t\leqslant\tau}|(K^{(n)}.X) - (K.X)_t| \longrightarrow 0 \qquad (n\to\infty).$$

利用上述结论可给出半鞅随机分析的一个更直接的黎曼(G.F.B.Riemann)和

逼近描述．

定理6 设 H 为一个适应过程，它的几乎所有样本轨道是右连续且逐点左极限存在的 $\mathbf{R}^+$ 上函数(这种过程称为**右连左极适应过程**)，而令

$$H_{t-} = \lim_{\substack{s \uparrow t \\ s<t}} H_s \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

显然，$\{H_{t-}, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为左连续过程，从而是可料过程．若 $\{H_{t-}, t \in \mathbf{R}^+\}$ 关于 X 可积，而且对于任意 $n \in \mathbf{N}$，

$$0 = \tau_0^{(n)} \leqslant \tau_1^{(n)} \leqslant \cdots$$

为一列停时，使得

$$\delta_n = \sup_{j \geqslant 0} | \tau_{j+1}^{(n)} - \tau_j^{(n)} | \longrightarrow 0 \qquad (\text{a.s.}, n \to \infty),$$

$$\tau_j^{(n)} \uparrow +\infty \qquad (j \to +\infty, \forall n \in \mathbf{N}),$$

则在依概率收敛意义下，

$$\sup_{t \leqslant \tau} \left| \sum_{j \geqslant 0} \langle H_{\tau_j^{(n)}}, X_{\tau_{j+1}^{(n)}} - X_{\tau_j^{(n)}} \rangle_{\mathbf{R}^m} - \int_0^t H_{s-} \mathrm{d}X_s \right| \longrightarrow 0 \qquad (n \to \infty),$$

其中 τ 为任一有限停时．

3.4 伊藤公式

伊藤公式相当于通常积分中的变量替换公式，它可以避免利用定义来计算随机积分．

定理7 (伊藤公式) 设 $F: \mathbf{R}^m \times \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^k$ 为连续映照，关于第一个变量二次可微分，关于第二个变量一次可微分．假设 $\{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^m$ 值连续局部鞅，$\{V_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^n$ 值有限变差适应过程，那么对于任意 $t \in \mathbf{R}^+$，有

$$F(M_t, V_t) - F(M_0, V_0) = \int_0^t \nabla_1 F(M_s, V_s) \mathrm{d}M_s +$$

$$\int_0^t \nabla_2 F(M_s, V_s) \mathrm{d}V_s + \frac{1}{2} \int_0^t \nabla_1^2 F(M_s, V_s) \mathrm{d}[M]_s,$$

其中 $\nabla_1 F$, $\nabla_2 F$ 及 $\nabla_1^2 F$ 分别表示关于 F 的第一个变量、第二个变量求一阶导数、第一个变量求二阶导数．

对于布朗运动 $\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 的伊藤公式具有如下简洁的形式．

定理8 设 $F: \mathbf{R}^m \to \mathbf{R}^k$ 为二次可微映照，$\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^m$ 值布朗运动，则对于任何 $t \in \mathbf{R}^+$，

$$F(B_t) = F(B_0) + \int_0^t \nabla F(B_s) \mathrm{d}B_s + \frac{1}{2} \int_0^t \nabla^2 F(B_s) \mathrm{d}s.$$

上式可理解为利用法则

$$\mathrm{d}B_t^2 = \mathrm{d}t, \quad (\mathrm{d}B_t)^n = 0 \qquad (n \geqslant 3),$$

以及对 F 进行泰勒(G.I.Taylor)展开而得到的结果．

定理9 (分部积分公式) 设 X 与 Y 均为 $\mathbf{R}^m$ 值连续半鞅，则

$$\langle X_t, Y_t\rangle_{\mathbf{R}^m} = \int_0^t X_s \mathrm{d}Y_s + \int_0^t Y_s \mathrm{d}X_s + [X, Y]_t \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

伊藤公式与牛顿 - 莱布尼兹公式相比，前者多了一个二阶项，这是鞅波动性量级的体现．经过适当变换，可将这个二阶项吸收到一种所谓的**斯特拉托诺维奇**(Stratonovich)**随机积分**中去，使这种随机积分的运算与牛顿 - 莱布尼兹积分运算类似．

定义 6 设 X 与 Y 均为连续半鞅，则 Y 关于 X 的斯特拉托诺维奇随机积分定义为

$$\int_0^t Y_s \partial X_s = \int_0^t Y_s \mathrm{d}X_s + \frac{1}{2}[Y, X]_t \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

有时记 $\left\{\int_0^t Y_s \partial X_s, t \in \mathbf{R}^+\right\}$ 为 $\int Y \circ \mathrm{d}X$；记 $\int_0^t Y_s \partial X_s$ 为 $\int_0^t Y_s \circ \mathrm{d}X_s$.

定理 10 设 X 与 Y 为连续半鞅，则 $\forall t \in \mathbf{R}^+$,

1° $\langle X_t, Y_t\rangle_{\mathbf{R}^m} = \int_0^t X_s \partial Y_s + \int_0^t Y_s \partial X_s + \langle X_0, Y_0\rangle_{\mathbf{R}^m}$;

2° 对于 $\mathbf{R}^m$ 上三次可微函数 F，有

$$F(X_t) = F(X_0) + \int_0^t \nabla F(X_s) \partial X_s,$$

其中 ∇F 表示 F 的导数．

半鞅的随机积分和斯特拉托诺维奇积分的区别可在下面的黎曼和逼近公式中得到清楚的体现．

定理 11 设 H 为局部有界可料过程，$H_0 = 0$，X 与 Y 均为连续半鞅．记

$$t_i^n = \frac{i}{2^n} \wedge t \qquad (i = 0, 1, 2, \cdots),$$

且令

$$I_t^{(n)} = \sum_{i \geq 0} \langle H_{t_i^n}, X_{t_{i+1}^n} - X_{t_i^n}\rangle_{\mathbf{R}^m},$$

$$S_t^{(n)} = \sum_{i \geq 0} \frac{1}{2}\langle Y_{t_{i+1}^n} + Y_{t_i^n}, X_{t_{i+1}^n} - X_{t_i^n}\rangle_{\mathbf{R}^m},$$

则当 $n \to \infty$ 时，在依概率收敛意义下，对于任意 $T > 0$,

$$\sup_{t \leq T}\left| I_t^{(n)} - \int_0^t H_s \mathrm{d}X_s \right| \to 0,$$

$$\sup_{t \leq T}\left| S_t^{(n)} - \int_0^t Y_s \partial X_s \right| \to 0.$$

例 3 利用伊藤公式可以验证：若 $\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}$ 值布朗运动，则下述三个过程均为鞅：

$$\left\{\exp\left(\frac{1}{2}t\right)\cos B_t, t \in \mathbf{R}^+\right\}; \left\{\exp\left(\frac{1}{2}t\right)\sin B_t, t \in \mathbf{R}^+\right\}; \left\{\exp\left(B_t - \frac{1}{2}t\right), t \in \mathbf{R}^+\right\}.$$

例 4 设 $\{(B_t^1, B_t^2, \cdots, B_t^m), t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^m$ 值布朗运动，

$$R_t = \left(\sum_{i=1}^m (B_t^i)^2\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+),$$

则利用伊藤公式可以验证：

$$R_t - R_0 = \int_0^t \sum_{i=1}^m \frac{B_s^i}{R_s} \mathrm{d}B_s^i + \int_0^t \frac{m-1}{2R_s} \mathrm{d}s \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

通常称 $\{R_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 m 阶贝塞尔(J. Bessel)过程．

3.5 鞅表示定理

如果 $B = \{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为本篇1.2节中定义8意义下的布朗运动，$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为其完备自然 σ 代数流，那么对于任何关于 B 可积的 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 可料过程 H，其随机积分 $H.B$ 为 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 连续局部鞅．反过来，有如下关于**布朗运动的鞅表示定理**．

定理 12 设 $\{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 局部鞅，$M_0 = 0$，则存在唯一关于 B 可积的可料过程 H，使得

$$M_t = \int_0^t H_s \mathrm{d}B_s \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

特别地，任何 $\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 局部鞅为连续局部鞅．

关于泊松过程有如下类似鞅表示定理．

定理 13 设 $\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为强度为 λ 的泊松过程，$\{\mathscr{G}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为其完备自然 σ 代数流，则一切零初值 $\{\mathscr{G}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 局部鞅都可表示为某一个可料过程关于 $\{X_t - \lambda t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 的勒贝格－斯蒂尔切斯积分．

3.6 指数鞅和格尔萨诺夫定理

定理 14（指数鞅） 设 $M = \{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 和 $A = \{A_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 均为 $\mathbf{R}$ 值连续适应过程，$A_0 = 0$，A 还是增过程．对于任意 $\alpha \in \mathbf{R}$，定义

$$Z_t^\alpha = \exp\{\alpha M_t - \frac{1}{2}\alpha^2 A_t\} \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+),$$

则以下诸断言等价：

1° $\{M_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为局部鞅，且 $[M] = A$；

2° 对于任意 $\alpha \in \mathbf{R}$，$\{Z_t^\alpha, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为局部鞅．

进一步，若 M 为 L^2 鞅（即 $E[M_t^2] < +\infty, \forall t \in \mathbf{R}^+$），$[M] = A$，$\alpha$ 满足 $Z_0^\alpha \in L^2$，以及

$$E\left(\int_0^t [Z_s^\alpha]^2 \mathrm{d}A_s\right) < +\infty,$$

则 $\{Z_t^\alpha, t \in \mathbf{R}^+\}$ 也是 L^2 鞅．

定理 15 对于 $n = 0, 1, 2, \cdots$，定义

$$H_n(x, y) = \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\alpha^n} \exp\{\alpha x - \frac{1}{2}\alpha^2 y\}\Big|_{\alpha=0}.$$

设 M 为连续局部鞅，A 为零初值有界增过程．若存在 $\alpha_0 > 0$，使得

$$E[\exp(\alpha_0 |M_t|)] < +\infty \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+),$$

且 $\{Z_t^a, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为鞅，$\forall |\alpha| < \frac{\alpha_0}{2}$，则对于任意 $n = 0,1,2,\cdots$，过程

$$\{H_n(M_t, A_t), t \in \mathbf{R}^+\}$$

为 L^2 鞅．

定理 16 (格尔萨诺夫(I.V.Girsanov)定理)　设 $B = \{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^m$ 值布朗运动，$H = \{H_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^m$ 值适应可测过程，满足

$$\int_0^{+\infty} |H_t|^2 \mathrm{d}t < +\infty \qquad (\text{a.s.}).$$

对于 $T \in \mathbf{R}^+$，令

$$Z_T(H) = \exp\left\{\int_0^T H_t \mathrm{d}B_t - \frac{1}{2}\int_0^T |H_t|^2 \mathrm{d}t\right\}.$$

假定 $E[Z_T(H)] = 1$，定义

$$Q(A) = \int_A Z_T(H) \mathrm{d}P \qquad (\forall A \in \mathscr{F}),$$

$$\widetilde{B}_t = B_t - \int_0^t H_s \mathrm{d}s \qquad (\forall t \in [0, T]),$$

则 $\{\widetilde{B}_t, t \in [0,T]\}$ 在概率测度 Q 下为布朗运动．通常称

$$\{B_t, t \in [0,T]\} \longrightarrow \{\widetilde{B}_t, t \in [0,T]\}$$

为**格尔萨诺夫变换**．

4　随机微分方程

4.1　伊藤随机微分方程

设 $\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^m$ 值布朗运动．

定义 1　伊藤随机微分方程是指

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t = b(t, X)\mathrm{d}t + \sigma(t, X)\mathrm{d}B_t, \\ X_0 = x \in \mathbf{R}^n. \end{cases}$$

它是如下随机积分方程的形式表达：

$$X_t = x + \int_0^t b(s, X)\mathrm{d}s + \int_0^t \sigma(s, x)\mathrm{d}B_s \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+),$$

其中

$$b: \mathbf{R}^+ \times C(\mathbf{R}^+ \to \mathbf{R}^n) \to \mathbf{R}^n, \sigma: \mathbf{R}^+ \times C(\mathbf{R}^+ \to \mathbf{R}^n) \to \mathbf{R}^n \otimes \mathbf{R}^m$$

均为可测映照．最常见的是所谓**马氏型(马尔可夫型)伊藤随机微分方程**．这时 $b(t,\cdot)$ 及 $\sigma(t,\cdot)$ 作为轨道空间 $C(\mathbf{R}^+ \to \mathbf{R}^n)$ 上的泛函仅依赖于时刻 t 的轨道值，

而且方程可化为

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t = b(t, X_t)\mathrm{d}t + \sigma(t, X_t)\mathrm{d}B_t, \\ X_0 = x \in \mathbf{R}^n, \end{cases}$$

其中 $b: \mathbf{R}^+ \times \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n, \sigma: \mathbf{R}^+ \times \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n \otimes \mathbf{R}^m$ 为可测映照．

1. 伊藤随机微分方程的强解

定义2 （强解及轨道唯一性） 给定滤子概率空间$(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$以及其上的 $\mathbf{R}^m$ 值$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$布朗运动$\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$，以及 $b: \mathbf{R}^+ \times \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$ 和$\sigma: \mathbf{R}^+ \times \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n \otimes \mathbf{R}^m$，若存在$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$适应可测过程$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$，使得对于任何$\mathscr{F}_0$可测 $\mathbf{R}^n$ 值随机变量ξ，有

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t = b(t, X_t)\mathrm{d}t + \sigma(t, X_t)\mathrm{d}B_t, \\ X_0 = \xi; \end{cases}$$

或等价地，对于任意 $t \in \mathbf{R}^+$，

$$X_t = \xi + \int_0^t b(s, X_s)\mathrm{d}s + \int_0^t \sigma(t, X_s)\mathrm{d}B_s,$$

则称$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为马氏型伊藤随机微分方程的强解．另外，若 X 及X' 均为上述方程的强解蕴含 X 与 X' 无区别，则称该方程的解是**轨道唯一的**．

下面是马氏型伊藤随机微分方程的强解的例子．

(1) 奥恩斯坦－乌伦贝克过程 考虑郎之万(Langevin)方程：

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t = -\boldsymbol{\beta} X_t \mathrm{d}_t + \boldsymbol{\sigma} \mathrm{d}B_t, \\ X_0 = \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n, \end{cases}$$

其中 $\boldsymbol{\beta}$ 为 $n \times n$ 阶常数矩阵；$\boldsymbol{\sigma}$ 为 $n \times m$ 阶矩阵．此方程的唯一强解为：

$$\boldsymbol{X}_t = \exp(-\boldsymbol{\beta} t)\boldsymbol{x} + \int_0^t \exp(-\boldsymbol{\beta}(t-s))\boldsymbol{\sigma}\mathrm{d}B_s \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

上述过程$\{X_t, t \in \mathbf{R}^+\}$被称为**奥恩斯坦－乌伦贝克**(Ornstein-Uhlenbeck)过程．

(2) 几何布朗运动 考虑方程

$$\begin{cases} \mathrm{d}S_t = S_t(\mu \mathrm{d}t + \sigma \mathrm{d}B_t), \\ S_0 = x \in \mathbf{R}^+, \end{cases}$$

其中$\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为 $\mathbf{R}$ 值布朗运动；$B_0 = 0$；μ 和σ 为常数．上述方程的唯一强解为

$$S_t = x\exp\{\sigma B_t + (\mu - \frac{1}{2}\sigma^2)t\} \qquad (\forall t \in \mathbf{R}^+).$$

通常称$\{S_t, t \in \mathbf{R}^+\}$为**几何布朗运动**．它被用来模拟股票价格的变化过程，是期权定价理论中著名的布莱克－索尔斯(Black-Scholes)公式的出发点．

2. 伊藤随机微分方程的弱解

定义3（弱解及分布唯一性） 给定 $b: \mathbf{R}^+ \times \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$ 及$\sigma: \mathbf{R}^+ \times \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n \otimes \mathbf{R}^m$．若存在滤子概率空间$(\Omega, (\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+), \mathscr{F}, P)$及其上的$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$布朗运动$\{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$，以及 $\mathbf{R}^m$ 值$\{\mathscr{F}_t, t \in \mathbf{R}^+\}$适应可测过程，使得对于任何$\mathscr{F}_0$可测的随机变量$\xi$，有

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t = b(t,X_t)\mathrm{d}t + \sigma(t,X_t)\mathrm{d}B_t, \\ X_0 = \xi, \end{cases}$$

则称上述伊藤随机微分方程有弱解．若 X 和 X' 为上述方程的两个弱解蕴含 X 与 X' 互相等价，则称上述方程有**分布唯一的弱解**．而当该方程的任何两个弱解还无区别时，称该方程解有轨道唯一性．

3. 伊藤随机微分方程强解与弱解的存在性

强解与弱解的存在性有如下关系．

定理 1 马氏型伊藤随机微分方程有唯一强解的充分必要条件为：该方程有弱解且具有轨道唯一性．

定理 2 设马氏型伊藤随机微分方程

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t = b(t,X_t)\mathrm{d}t + \sigma(t,X_t)\mathrm{d}B_t, \\ X_0 = \xi \end{cases}$$

中的系数 b 和 σ 关于第二个变量均满足：

1° 局部利普希茨(Lipschitz)条件 对于任意 $k>0$，存在 $C_k>0$，使得对于任意 $|x|_{\mathbf{R}^n}\leqslant k$，$|y|_{\mathbf{R}^n}\leqslant k$，及 $\forall t\in\mathbf{R}^+$，有

$$|\sigma(t,x)-\sigma(t,y)|_{\mathbf{R}^n\otimes\mathbf{R}^m}+|b(t,x)-b(t,y)|_{\mathbf{R}^n}\leqslant C_k|x-y|_{\mathbf{R}^n};$$

2° 线性增长条件 存在 $L>0$，使得 $\forall t\in\mathbf{R}^+$，有

$$|\sigma(t,x)|^2_{\mathbf{R}^n\otimes\mathbf{R}^m}+|b(t,x)|^2_{\mathbf{R}^n}\leqslant L(1+|x|^2_{\mathbf{R}^n}) \qquad (\forall x\in\mathbf{R}^n),$$

则该方程存在唯一强解．

定理 3 若伊藤随机微分方程

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t = b(t,X)\mathrm{d}t + \sigma(t,X)\mathrm{d}B_t, \\ X_0 = \xi \end{cases}$$

中的系数 b 和 σ 作为 $\mathbf{R}^+\times C(\mathbf{R}^+\to\mathbf{R}^n)$ 上映照有界连续，则该方程的弱解存在．

下面列举伊藤随机微分方程的强解与弱解存在性的例子．

(1) 田中方程 考虑田中(Tanaka)方程

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t = \mathrm{sgn}(X_t)\mathrm{d}B_t, \\ X_0 = 0, \end{cases}$$

其中

$$\mathrm{sgn}(x) = I_{(0,+\infty)}(x) - I_{(-\infty,0]}(x) \qquad (\forall x\in\mathbf{R}).$$

设 $\{X_t, t\in\mathbf{R}^+\}$ 为 $(\Omega,\mathscr{F},P)$ 上实值布朗运动，令

$$B_t = \int_0^t \mathrm{sgn}(X_s)\mathrm{d}X_s \qquad (\forall t\in\mathbf{R}^+).$$

显然，$\{B_t, t\in\mathbf{R}^+\}$ 为布朗运动，而且

$$\mathrm{d}B_t = \mathrm{sgn}(X_t)\mathrm{d}X_t.$$

所以由

$$\mathrm{sgn}(x)^2 = I \qquad (\forall x\in\mathbf{R})$$

知，$\{X_t, t\in\mathbf{R}^+\}$ 为田中方程的一个弱解．

另外，$\{-X_t, t\in\mathbf{R}^+\}$ 也是实值布朗运动，它同样也为田中方程的弱解．由于

$\{X_t, t\in \mathbf{R}^+\}$ 与 $\{-X_t, t\in \mathbf{R}^+\}$ 不是无区别的，因而田中方程的解不具有轨道唯一性．但利用布朗运动的莱维特征刻画及 $[X]_t = t, \forall t\in \mathbf{R}^+$ 知，田中方程的解必为实值布朗运动，从而田中方程具有分布唯一性．

(2) 格尔萨诺夫的随机微分方程　设 $0<\alpha<\frac{1}{2}$，考虑格尔萨诺夫随机微分方程

$$\begin{cases} dX_t = |X_t|^\alpha dB_t, \\ X_0 = 0. \end{cases}$$

显然，$X\equiv 0$ 为该方程的弱解．设 $\{B_t, t\in \mathbf{R}^+\}$ 为实值布朗运动，则可以验证：

1° $\left\{\int_0^t \frac{1}{|B|^\alpha} dB_s, t\in \mathbf{R}^+\right\}$ 为 L^2 鞅；

2° $P\left(\int_0^\infty \frac{1}{|B_s|^{2\alpha}} ds = +\infty\right) = 1.$

现在令

$$\tau_t = \inf\left\{s\in \mathbf{R}^+ : \int_0^s \frac{1}{|B_u|^{2\alpha}} du > t\right\} \qquad (\forall t\in \mathbf{R}^+),$$

$$X' = \{B_{\tau_t}, t\in \mathbf{R}^+\},$$

则 $\tau_t \uparrow +\infty, t\to +\infty$，且由本篇 2.2 节中定理 12 知，

$$\widetilde{B} = \left\{\int_0^{\tau_t} \frac{1}{|B_s|^\alpha} dB_s, t\in \mathbf{R}^+\right\}$$

为 $\{\mathscr{G}_t, t\in \mathbf{R}^+\}$ 布朗运动，其中 $\mathscr{G}_t = \mathscr{F}_{\tau_t}, \forall t\in \mathbf{R}^+$，而 $\{\mathscr{F}_t, t\in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\{B_t, t\in \mathbf{R}^+\}$ 的完备自然 σ 代数流．进而可证明：

$$\int_0^t |X'_s|^\alpha d\widetilde{B}_s = X'_t \qquad (\forall t\in \mathbf{R}_+),$$

因而 X' 也是弱解．显然，X 与 X' 不相互等价，所以这一方程不具有解的分布唯一性．

(3) 布朗桥的随机微分方程　考虑布朗桥的随机微分方程

$$\begin{cases} dX_t = \frac{X_t - y}{t-b} dt + dBt \qquad (0\leqslant t<b), \\ X_0 = x\in \mathbf{R}^m, \end{cases}$$

其中

$$y\in \mathbf{R}^m;$$
$$b\in (0,+\infty).$$

$\{B_t, t\in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}^m$ 值布朗运动，则利用分部积分公式容易证明过程

$$X = \left\{(b-t)\int_0^t \frac{1}{b-s} dB_s + x + \frac{t}{b}(y-x), t\in [0,b]\right\}$$

为上述方程的解，而且 X 正好是本篇 1.2 节的 2 中引入的从 x 出发到达 y 的布朗桥．

4.2 鞅　问　题

考虑伊藤型方程

$$\begin{cases} \mathrm{d}\boldsymbol{X}_t = \boldsymbol{b}(t,\boldsymbol{X})\mathrm{d}t + \boldsymbol{\sigma}(t,\boldsymbol{X})\mathrm{d}B_t, \\ \boldsymbol{X}_0 = \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n. \end{cases}$$

令 $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{T}}$,即 $\boldsymbol{a} = [a_{ij}]_{1\leqslant i,j\leqslant m}$,而

$$a_{ij}(t,X) = \sum_{k=1}^{m}\sigma_k^i(t,X)\sigma_k^j(t,X),$$

对于 $f \in C_b^2(\mathbf{R}^n)$,定义

$$(\mathrm{L}f)(t,X) = \sum_{i=1}^{n} b_i(t,X)\partial_i f(X_t) + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}(t,X)\partial_i\partial_j f(X_t).$$

定理 4　伊藤型方程存在弱解等价于存在滤子概率空间 $(\Omega,(\mathscr{F}_t,t\in\mathbf{R}^+),\mathscr{F},P)$ 及其上的适应可测过程 $\{X_t,t\in\mathbf{R}^+\}$,使得 $\forall f\in C_b^2(\mathbf{R}^n)$,

$$M_t^f \equiv f(X_t) - x - \int_0^t (\mathrm{L}f)(s,X)\mathrm{d}s \qquad (\forall t\in\mathbf{R}^+)$$

为连续局部鞅．此时,

$$[M^f]_t = -\int_0^t f(X_s)(\mathrm{L}f)(s,X)\mathrm{d}s \qquad (\forall t\in\mathbf{R}^+).$$

特别地,当

$$b(t,X) \equiv b(X_t) \text{ 及 } \sigma(t,X) \equiv \sigma(X_t) \qquad (\forall t\in\mathbf{R}^+)$$

时,方程的弱解 $\{X_t^x,t\in\mathbf{R}^+,\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n\}$ 为马氏过程,它的无穷小生成子为 $(L,C_b^2(\mathbf{R}^n))$ 的扩张,而 $\forall f\in C_b^2(\mathbf{R}^n),\forall\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n$,

$$\mathrm{L}f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} b_i(\boldsymbol{x})\partial_i f(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}(\boldsymbol{x})\partial_i\partial_j f(\boldsymbol{x}).$$

利用定理 4,可将伊藤随机微分方程的弱解与所谓的鞅问题联系起来．在许多情况下,鞅问题又与偏微分方程的解相联系．因而伊藤型随机微分方程解的鞅问题提法是联系随机分析与偏微分方程理论的桥梁．详细情况参看文献[11].

4.3 费曼 - 卡茨公式

考虑热方程的柯西(A.L.Cauchy)问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = (\mathrm{L}+V)u \qquad (0\leqslant t\leqslant T), \\ u(0,\boldsymbol{x}) = \varphi(\boldsymbol{x}), \end{cases}$$

以及椭圆边值问题

$$\begin{cases} (\mathrm{L}+V)u = f(\boldsymbol{x}) \qquad (\boldsymbol{x}\in G), \\ \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \varphi(\boldsymbol{x}) \qquad (x\in\partial G), \end{cases}$$

其中 $\mathrm{L}f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} b_i(\boldsymbol{x})\partial_i f(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}(\boldsymbol{x})\partial_i\partial_j f(\boldsymbol{x}), f \in C_b^2(\mathbf{R}^n), \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n$, $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}) = [a_{ij}(\boldsymbol{x})]_{1\leqslant i,j\leqslant n}$ 为对称严格正定矩阵；L 为椭圆微分算子；通常把可测函数 $V:\mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$ 称为**位势项**，并假设 $G \subset \mathbf{R}^n$ 为具有 C^2 类边界 ∂G 的有界开区域．记 $\overline{G} = G \cup \partial G$.

由偏微分方程理论知，当系数 $\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_n)$ 和 $\boldsymbol{a}, V$，以及初（或边）值 φ 具有一定正则性时，以上微分方程有唯一解．而**费曼-卡茨**（Feynmann-Kac）**公式**则给出了这些解的概率表示．

设 $\{X_t^x, t \in \mathbf{R}^+, \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n\}$ 满足下述随机微分方程：

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t^x = \boldsymbol{b}(X_t^x)\mathrm{d}t + \boldsymbol{\sigma}(X_t^x)\mathrm{d}B_t, \\ X_0^x = \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^m, \end{cases}$$

其中

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{T}}.$$

定理 5　设 $b \in C_b^3(\mathbf{R}^+ \to \mathbf{R}^n), \sigma \in C_b^3(\mathbf{R}^+ \to \mathbf{R}^n \otimes \mathbf{R}^m), \varphi \in C_b^2(\mathbf{R}^n), V \in C(\mathbf{R}^n)$，$V$ 有上界，则

$$u(t,\boldsymbol{x}) = E\left(\varphi(X_t^x)\exp\left(\int_0^t V(X_s^x)\mathrm{d}s\right)\right) \qquad (t \in [0,T], \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n),$$

为热方程柯西问题在 $C_b^{1,2}(\mathbf{R}^+ \times \mathbf{R}^n) \cap C_b(\mathbf{R} \times \mathbf{R}^n)$ 中唯一解．

定理 6　设

$$\tau_x = \inf\{t > 0: X_t^x \in \overline{G}\},$$

则当 $b \in C_b^3(\mathbf{R}^+ \to \mathbf{R}^n), \sigma \in C_b^3(\mathbf{R}^+ \to \mathbf{R}^n \otimes \mathbf{R}^m), \varphi \in C_b^2(\mathbf{R}^n), V \in C(\mathbf{R}^n)$，$V$ 有上界时，函数

$$u(x) = E\left(\varphi(X_{\tau_x}^x)\exp\left(\int_0^{\tau_x} V(X_s^x)\mathrm{d}s\right)\right) - E\left(\int_0^{\tau_x} f(X_t^x)\exp\left(\int_0^t V(X_s^x)\mathrm{d}s\right)\mathrm{d}t\right)$$

为椭圆边值问题的唯一解．

例 1　设 $\{X_t^x, t \in \mathbf{R}^+\}$ 满足方程

$$\begin{cases} \mathrm{d}X_t^x = b(X_t^x)\mathrm{d}t + \sigma(X_t^x)\mathrm{d}B_t, \\ X_0^x = x \in \mathbf{R}, \end{cases}$$

其中 $b \in C_b^1(\mathbf{R}); \sigma \in C_b^1(\mathbf{R}); \{B_t, t \in \mathbf{R}^+\}$ 为 $\mathbf{R}$ 值布朗运动．取 $l, r \in \mathbf{R}, l < r$, $x \in [l, r]$．定义

$$\tau_{[l,r]} = \inf\{t > 0: X_t^x \overline{\in} [l,r]\}.$$

欲求

$$P(X_{\tau[l,r]}^x = l).$$

解　任取 $\alpha < l$ 及 $\beta > r$，令 $u:(\alpha,\beta) \to \mathbf{R}$ 为

$$u(y) = \int_c^y \left(\exp\left(-\int_c^s \frac{2b(x)}{\sigma^2(x)}\mathrm{d}x\right)\right)\mathrm{d}s \qquad (\forall\, y \in (\alpha,\beta)),$$

其中 $c \in (\alpha,\beta)$ 固定．显然，

$$b(y)u'(y) + \frac{1}{2}\sigma^2(y)u''(y) = 0.$$

则由定理 6 知，

$$u(x)=E(u(X^x_{\tau[l,r]})).$$

因此,

$$u(x)=u(l)P\{X^x_{\tau[l,r]}=l\}+u(r)P\{X^x_{\tau[l,r]}=r\}.$$

但

$$P\{X^x_{\tau[l,r]}=l\}+P\{X^x_{\tau[l,r]}=r\}=1,$$

故

$$P\{X^x_{\tau[l,r]}=l\}=\frac{u(r)-u(x)}{u(r)-u(l)}.$$

5 随机分析若干研究方向

5.1 高斯空间上的分析

高斯空间上的分析包括所谓的马利亚万(P. Malliavin)分析和白噪声分析两部分.

马利亚万分析又称为马利亚万随机变分学,主要由马利亚万在1976年首次提出主要框架.马利亚万分析的主要框架为:

令

$$\Omega\xlongequal{\text{def}}\{\omega\in C(\mathbf{R}^+\to\mathbf{R}^m):\omega(0)=0\},$$

$$H\xlongequal{\text{def}}\left\{h\in\Omega:h\text{ 绝对连续,且 }\|h\|_H^2=\int_0^{+\infty}\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}h(t)\right|^2\mathrm{d}t<+\infty\right\},$$

则 Ω 按有界区间上一致收敛拓扑成为弗雷歇(M. Frechét)空间,而 H 按范数 $\|\cdot\|_H$ 成为可分希尔伯特空间(其相应内积记为 $\langle\cdot,\cdot\rangle_H$).明显地 $H\to\Omega$,其中 $\to$ 表示连续稠密地线性嵌入.在 Ω 上存在唯一的博雷尔概率测度 P,使得坐标过程

$$W_t(\omega)=\omega(t)\qquad(\forall t\in\mathbf{R}^+,\omega\in\Omega)$$

为布朗运动.因此 P 称为 Ω 上的维纳测度.对于 $X\in\Omega$,定义 $\tau_X:\Omega\to\Omega$ 为

$$\tau_X(\omega)=\omega+X\qquad(\forall\omega\in\Omega),$$

则由卡梅伦-马丁-塞加尔(Cameron-Martin-Segal)定理知,对于任意博雷尔可测集 A,当且仅当 $X\in H$ 时,有

$$P(\tau_X^{-1}(A))=0\Leftrightarrow P(A)=0.$$

正因为如此,H 称为 (Ω,P) 的卡梅伦-马丁空间,而 (Ω,H,P) 称为经典维纳空间.现在设 $F:\Omega\to R$ 为可测函数(即维纳泛函),若存在可测映射 $\mathrm{D}F:\Omega\to H$,满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(\omega+th)\mid_{t=0}=\langle\mathrm{D}F(\omega),h\rangle_H\qquad(\forall h\in H,\text{a.s.},\omega\in\Omega),$$

则称 F 在马利亚万意义下可微,且称 DF 为 F 的马利亚万梯度函数,称 D 为马利亚万梯度算子．可以证明:D 是 $L^2(\Omega,P)$ 到 $L^2(\Omega,P\mid H)$(即 H 值平方可积函数全体)内的稠定可闭算子,其对偶算子 δ 为 $L^2(\Omega,P\mid H)$ 到 $L^2(\Omega,P)$ 内的稠定可闭算子．称算子 δ 为马利亚万散度算子,δ 是关于布朗运动之随机积分在非适应情况下的推广．

粗略地讲,以 D 和 δ 为基本算子,开展类似于 $\mathbf{R}^m$ 上的分析学研究就是马利亚万分析．由于 Ω 为无穷维空间,因而马利亚万分析是无穷维空间上的分析学．另外,由于马利亚万意义下的可微函数甚至可以不是在 Ω 上的连续函数,因而马尔亚万分析是在 Ω 上全新的非经典分析学．进一步,在马利亚万分析框架中,绝大部分随机分析理论可以简洁优美的方式陈述且得到推广,所以马利亚万分析成为研究许多重要问题的有力工具,特别是它在下述问题的研究中取得巨大成功:对赫尔姆曼德(Hormmander)正则化定理及阿蒂亚-辛格(Atiyah-Singer)指标定理的概率证明;热核的短时间渐近估计;随机振荡积分的估计;维纳泛函之分布关于勒贝格测度的绝对连续性及密度函数的光滑性等．马利亚万分析还可以建立在任何高斯空间上(即高斯测度空间上),而且在某种意义上保持不变．近几年,类似的框架已部分建立在像路径空间和环空间这种无穷维流形上,而且被应用于流形上热核的短时间渐近估计、一类流形上费曼积分的数学定义及紧群上杨-米尔斯(Yang-Miss)场的量子化研究中．

白噪声分析是1975年由飞田武幸(T.Hida)首先提出的,其基本思想是把维纳泛函看成白噪声泛函．

白噪声分析的基本框架为:

设 $\mathscr{S}(\mathbf{R})$ 为施瓦兹(Schwarz)速降函数空间,而 $\mathscr{S}'(\mathbf{R})$ 为其线性拓扑对偶空间(即施瓦兹缓增广义函数空间)．明显地,$\mathscr{S}(\mathbf{R})\to L^2(\mathbf{R},\mathrm{d}x)\to\mathscr{S}'(\mathbf{R})$．在 $\mathscr{S}'(\mathbf{R})$ 上存在唯一博雷尔概率测度 μ,满足

$$\int_{\mathscr{S}'(\mathbf{R})}\exp(i\langle x,\xi\rangle)\mu(\mathrm{d}x)=\exp\left\{-\frac{1}{2}\|\xi\|^2_{L^2(\mathbf{R},\mathrm{d}x)}\right\}\qquad(\forall\,\xi\in\mathscr{S}(\mathbf{R})).$$

由于在广义函数求导意义下,由布朗运动 $\{B_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 的轨道之导数组成的所谓白噪声过程 $\{\dot{B}_t,t\in\mathbf{R}^+\}$ 可看成 $\mathscr{S}'(\mathbf{R})$ 值随机变量,而且其像测度正好是 μ,所以,称 μ 为 $\mathscr{S}'(\mathbf{R})$ 上的白噪声测度,$\mathscr{S}'(\mathbf{R})$ 上的博雷尔可测函数为白噪声泛函,$(\mathscr{S}'(\mathbf{R}),\mu)$ 为白噪声空间．

白噪声空间是高斯空间．利用 $\mathscr{S}(\mathbf{R})$ 上的装配希尔伯特结构可以构造 $\mathscr{S}'(\mathbf{R})$ 上的试验泛函(即飞田武幸试验泛函)空间 $(\mathscr{S})$ 以及广义泛函(即飞田武幸广义泛函)空间 $(\mathscr{S}')$,使得

$$(\mathscr{S})\to(L^2)\xlongequal{\text{def}}L^2(\mathscr{S}'(R),\mu)\to(\mathscr{S}'),$$

从而可在 $\mathscr{S}'(\mathbf{R})$ 上开展类似于 $\mathbf{R}^m$ 上广义函数理论的研究．

粗略地讲,白噪声分析就是 $(\mathscr{S}'(\mathbf{R}),\mu)$ 上的广义函数理论．它特别适用于研究某些量子力学和量子场论的问题．例如,费曼积分有时可看成复值的飞田武幸广义泛函．

$P(\varphi)_2$ 场的"场测度"可看成正的飞田武幸广义泛函．由于布朗运动也可看成白噪声泛函，因而白噪声分析也可以用简洁的方式处理随机积分和随机分析理论.

最后，白噪声分析已被建立在任何以核空间为基础空间的高斯空间上，它构成了高斯空间的广义函数理论．

关于高斯空间上的分析详细情况可参看文献[3].

5.2 狄氏型理论

狄利克雷(P.G.L.Dirichlet)型理论又简称狄氏型理论，它发源于1959年比尔林格(Bearling)和丹尼(J.Deny)首次引进的狄利克雷空间理论，它是联系位势论与马尔可夫过程理论的桥梁．为了方便，在此仅介绍对称狄氏型的框架．

对称狄氏型的主要框架为：

设 E 为豪斯多夫(F.Hausdorff)拓扑空间，m 为在 E 上 σ 有限的测度，$(\mathscr{E},\mathscr{D}(\mathscr{E}))$ 为 $L^2(E,m)$ 上以 $\mathscr{D}(\mathscr{E})$ 为定义域的非负对称稠定双线性型的．令

$$\mathscr{E}_1(u,v)=\mathscr{E}(u,v)+(u,v)_{L^2(E,m)}\qquad(\forall u,v\in\mathscr{D}(\mathscr{E})).$$

明显地，$\mathscr{E}_1$ 为 $\mathscr{D}(\mathscr{E})$ 上的内积．若 $(\mathscr{D}(\mathscr{E}),\mathscr{E}_1)$ 为希尔伯特空间，且满足

$$u\in\mathscr{D}(\mathscr{E})\Rightarrow u^+\wedge 1\in\mathscr{D}(\mathscr{E}),$$

$$\mathscr{E}(u^+\wedge 1,u^+\wedge 1)\leqslant\mathscr{E}(u,u),$$

则称 $(\mathscr{E},\mathscr{D}(\mathscr{E}))$ 为 $L^2(E,m)$ 内的对称狄氏型的．狄氏型和 $L^2(E,m)$ 上对称马氏半群 $(T_t,t\in\mathbf{R}^+)$ 有如下一一对应关系：设 A 为 $(T_t,t\in\mathbf{R}^+)$ 的无穷小生成元，则

$$A\leftrightarrow\mathscr{E}(u,v)=(\sqrt{-A}u,\sqrt{-A}v),\quad\mathscr{D}(\mathscr{E})=\mathscr{D}(\sqrt{-A}).$$

狄氏型理论的主要问题是利用上述关系来构造与 $(T_t,t\in\mathbf{R}^+)$ 对应的良好性质之马尔可夫过程，并由此建立在 E 上的位势论和在 E 上的马尔可夫过程理论的联系．当 E 为局部紧第二可数空间时，福岛正俊(Fukushima)利用正则狄氏型的概念给出了上述中心问题一个充分条件．

对于上述问题，在一般情况的充要条件由马志明和阿尔比瓦里奥(S.Albeverio)给出．该结果特别适用于无穷维空间上狄氏型的研究，也是狄氏型理论在非相对论量子力学、欧几里德量子场论、无穷维空间上随机微分方程和偏微分方程、路径空间和环空间上随机分析学、无穷维马尔可夫过程构造论等领域中应用的理论基础．以这一结果为基础，由马志明、阿尔比瓦里奥、罗克纳(M.Rockner)等人建立的拟正则狄氏型理论已在数学和物理学等学科中得到广泛应用．

关于狄氏型理论的详细情况参看文献[8].

5.3 大偏差理论

大偏差理论来源于统计学中的大样本统计理论，希望从收敛于极限分布的速度来决定取样之大小．在概率论中它有较长的历史渊源．20世纪60～70年代瓦拉德汉(Varadhan)和唐斯克(Donsker)在前人工作的基础上，创立了大偏差理论的一

般框架，并建立了有关马尔可夫过程的大偏差原理．

大偏差原理的基本框架为：

设 E 为波利斯(Polish)空间(即完备可分度量空间)，$\{\mu_\varepsilon,\varepsilon>0\}$ 为 E 上一族博雷尔概率测度，且当 $\varepsilon\to 0$ 时，μ_ε 弱收敛于某点 $x_0\in E$ 处的狄拉克(P.A.M.Dirac)测度 δ_{x_0}．函数 $I:E\to[0,+\infty]$ 称为速率函数，若 $I\not\equiv+\infty$，且 $\{x\in E:I(x)\leqslant l\}$ 为 E 中紧集($\forall l\in[0,+\infty)$)；称 $\{\mu_\varepsilon,\varepsilon>0\}$ 满足以 I 为速率函数的大偏差原理，若

1° $\overline{\lim\limits_{\varepsilon\downarrow 0}}\varepsilon\log\mu_\varepsilon(F)\geqslant-\inf\limits_{x\in F}I(x)$　　($\forall$ 闭集 $F\subset E$)，

2° $\underline{\lim\limits_{\varepsilon\downarrow 0}}\varepsilon\log\mu_\varepsilon(G)\leqslant-\inf\limits_{x\in G}I(x)$　　($\forall$ 开集 $G\subset E$)，

大偏差原理的最大用处是处理拉普拉斯(P.S.Laplace)积分的渐近估计．例如，瓦拉德汉的"骨架定理"指出：若 $\{\mu_\varepsilon,\varepsilon>0\}$ 满足以 I 为速率函数的大偏差原理，则有

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\varepsilon\log\left(\int_E\exp\left(\frac{\Phi}{\varepsilon}\right)\mathrm{d}\mu_\varepsilon\right)=\sup_{x\in E}\{\Phi(x)-I(x)\}\qquad(\forall\Phi\in C_b(E)).$$

关于大偏差理论及其应用的较详细情况见参考文献[13]．

5.4　倒向随机微分方程

设$(\Omega,\mathscr{F},P)$为概率空间，$\{B_t,t\in\mathbf{R}^+\}$为其上布朗运动．倒向随机微分方程的典型结构为

$$\begin{cases}-\mathrm{d}Y_t=g(Y_t,Z_t,t)-Z_t\mathrm{d}B_t\qquad(0\leqslant t\leqslant T),\\ Y_T=\xi,\end{cases}\tag{5-1}$$

其中 ξ 为给定的 $\mathscr{F}_T$ 可测随机变量；$\{Z_t,t\in[0,T]\}$ 及 $\{Y_t,t\in[0,T]\}$ 为未知的 $\{\mathscr{F}_t,t\in[0,T]\}$ 适应可测过程，而 $\{\mathscr{F}_t,t\in[0,T]\}$ 为 $\{B_t,t\in[0,T]\}$ 的完备自然 σ 代数流．显然它与伊藤随机微分方程有本质区别．

设随机函数 $g:\Omega\times\mathbf{R}^n\times\mathbf{R}^{n\times m}\times[0,T]\to\mathbf{R}^n$ 满足：

1° 对于每一对 $(y,z)\in\mathbf{R}^n\times\mathbf{R}^{n\times m}$，过程 $\{g(\cdot,y,z,t),t\in[0,T]\}$ 是 $\mathbf{R}^n$ 值 $\{\mathscr{F}_t,t\in[0,T]\}$ 适应可测过程，且

$$E\left(\int_0^T|g(\cdot,0,0,s)|^2\mathrm{d}s\right)<+\infty;$$

2° 对于任意 $y,y'\in\mathbf{R}^n$，$z,z'\in\mathbf{R}^{n\times m}$，有

$$|g(\cdot,y,z,t)-g(\cdot,y',z',t)|\leqslant C(|y-y'|+|z-z'|),$$

其中 C 为正常数，则有上述倒向随机微分方程解(Y,Z)的存在唯一性定理．

定理1　若随机函数 g 满足上述条件1°，2°，则对于任何 $\xi\in L^2(\Omega,\mathscr{F}_T,P)$，倒向随机微分方程(5-1)式存在唯一的 $\{\mathscr{F}_t,t\in[0,T]\}$ 适应可测解

$$Y=\{Y_t,t\in[0,T]\}\ \text{和}\ Z=\{Z_t,t\in[0,T]\}.$$

倒向随机微分方程可以和伊藤型随机微分方程配合起来给出非线性偏微分方程解的概率解释，也可以用来研究随机最优控制和推广的动态规划原理，以及非线

性数学期望．特别地，它可用来研究金融衍生证券的定价和非冯·诺伊曼-摩根斯顿(Von Neumann-Morgenstern)偏好理论．

倒向随机微分方程理论的真正发展始于20世纪90年代，其中彭实戈作出了突出贡献．倒向随机微分方程理论在非线性偏微分方程理论、随机最优控制及动态规划理论，以及经济学理论等领域中的应用方兴未艾．关于倒向随机微分方程的详细情况可参看文献[13]．

5.5 量子随机分析

设$(\Omega,\mathscr{F},P)$为经典维纳空间，即$\Omega = C(\mathbf{R}^+\to\mathbf{R})$，$P$为维纳测度，则坐标过程$\{\omega(t),t\in\mathbf{R}^+\}$为其上布朗运动．记$\boldsymbol{H} = L^2(\Omega,\mathscr{F},P)$．对于$0\leqslant s<t$，定义

$$\mathscr{F}_{s,t} = \sigma\{\omega(b)-\omega(a);s\leqslant a\leqslant b\leqslant t\},$$

$$\boldsymbol{H}_{[s,t]} = L^2(\Omega,\mathscr{F},P)_{[s,t]}.$$

由于布朗运动具有独立增量性，对于$\mathbf{R}^+$的任意分划$0 = t_0<t_1<\cdots<t_n<\cdots$，有如下张量积分解：

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{\eta}_{[t_0,t_1]}\otimes\boldsymbol{H}_{[t_1,t_2]}\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{H}_{[t_{n-1},t_n]}\otimes\cdots$$

此处稳定序列取为$\{1\}$．

在$\{f:\int(1+\omega^2(t))f^2(\omega)P(\mathrm{d}\omega)<\infty\}\subset\boldsymbol{H}$上定义算子

$$(\phi(t)f)(\omega) = \omega(t)f(\omega)\qquad(\omega\in\Omega),$$

则$\{\phi(t),t\in\mathbf{R}^+\}$为$\boldsymbol{H}$上交换的自伴算子族．特别地，$\phi(t)I(\omega) = \omega(t)$，即为$(\Omega,\mathscr{F},P)$上通常的布朗运动．因此，在状态$1\in\boldsymbol{H}$，$\{\phi(t),t\in\mathbf{R}^+\}$实现了布朗运动

对于$\varphi\in L^2(\mathbf{R}^+)$，定义指数向量(相干态)

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\varphi)(\omega) = \exp\left(\int_{\mathbf{R}^+}\varphi(t)\mathrm{d}\omega(t)-\frac{1}{2}\int_{\mathbf{R}^+}\varphi^2(t)\mathrm{d}t\right),$$

则$\{\boldsymbol{\varepsilon}(\varphi):\varphi\in L^2(\mathbf{R}^+)\}$为$\boldsymbol{H}$中的完备线性独立子集．注意$\boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) = \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi I_{[0,t]})\otimes\boldsymbol{\varepsilon}(\varphi I_{[t,\infty)})$．

对于任意$x\in\mathbf{R},t\geqslant 0$，定义

$$\mathrm{U}_x(t)\boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) = \boldsymbol{\varepsilon}(\exp(\mathrm{i}xI_{[0,T]})\varphi),$$

$$\mathrm{V}_x(t)\boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}t+x\int_0^t\varphi(s)\mathrm{d}s\right)\boldsymbol{\varepsilon}(\varphi-xI_{[0,T]}),$$

则$\mathrm{U}_x(t),\mathrm{V}_x(t)$均为$\boldsymbol{H}$上酉算子，且$\{\mathrm{U}_x(t),x\in\mathbf{R}\}$和$\{\mathrm{V}_x(t),x\in\mathbf{R}\}$均为强连续酉群．由斯通(M.H.Stone)定理，存在自伴算子$\Lambda(t),\mathrm{P}(t)$，使

$$\mathrm{U}_x(t) = \exp(\mathrm{i}x\Lambda(t)),\quad \mathrm{V}_x(t) = \exp(\mathrm{i}x\mathrm{P}(t)).$$

定义

$$A(t) = \frac{1}{2}(\phi(t)+\mathrm{iP}(t)),$$

$$A^+(t) = \frac{1}{2}(\phi(t)-\mathrm{iP}(t)),$$

称$\{A(t), t\in \mathbf{R}^+\}$为湮灭过程；$\{A^+(t), t\in \mathbf{R}^+\}$为增生过程；$\{\Lambda(t), t\in \mathbf{R}^+\}$为计数过程．它们构成量子随机分析中的基本噪声过程.

特别地，对于任意θ,

$$(\cos\theta)\Phi(t) + (\sin\theta)P(t)$$

在状态1为布朗运动，而

$$\Phi(t) + \sqrt{\lambda}\Lambda(t) + \lambda t$$

在状态1为强度为λ的泊松过程．

量子随机分析是用概率的思想和方法研究希尔伯特空间中算子理论的学科，其中量子马尔可夫过程、算子动态半群、量子噪声、量子随机微分方程等都是近年来很活跃的课题．详情参看文献[16].

参考文献

1　龚光鲁著．随机微分方程引论．北京：北京大学出版社，1987.

2　黄志远著．随机分析基础．武汉：武汉大学出版社，1988.

3　黄志远，严加安著．无穷维随机分析引论．北京：科学出版社，1997.

4　Chung K L, Williams R J. Introduction to stochastic integration. 2nd ed. Berlin: Birkhaüser, 1990.

5　何声武，汪嘉冈，严加安著．半鞅与随机分析．北京：科学出版社，1995.

6　Ikeda N, Watanabe S. Stochastic differential equations and diffusion processes. 2nd ed. Amsterdam: North-Holland, 1989.

7　Itôk, Mekean H P Jr. Diffusion processes and their sample paths. New York: Springer-Verlag, 1965.

8　Ma Z M(马志明), Röckner M. Introduction to the theory of (Non-Symmectric) Dirichlet forms. New York: Springer-Verlag, 1992.

9　Revuz D, Yor M. Continuous Martingales and Brownian motion. Berlin: Springer-Verlay, 1991.

10　Rogers L C G, Williams D. Diffusions, Morkov processes and Martingales. 2nd ed. New York: Wiley&Son, 1992.

11　Stroock D W, Varadhan S R S. Multidimensional diffusion processes. New York: Springer-Verlag, 1979.

12　严加安著. 鞅与随机积分引论．上海：上海科技出版社，1981.

13　严加安，彭实戈，方诗赞等编著．随机分析选讲．北京：科学出版社，1997.

14　严加安著．随机分析简介．见：程民德主编．中国数学发展的若干主攻方向．南京：江苏教育出版社，1994.

15　Schuss S. Theory and applications of Stochastic differential equations. New York: J. Wileg & Sons, 1980.

16　Pathasarathy K R. An introduction to quantham stochastic calculus. Berlin: Birkhäuser, 1992.

·随机数学卷·

第15篇

排队论

编　者　徐光辉　袁学明
审校者　林元烈

目 录

引　言

排队论是研究排队现象随机规律的一门学科．它是随机数学、运筹学的一个重要分支，也是工程技术、工商管理、信息科学等的重要理论基础．

排队理论是20世纪50年代埃尔朗(A. K. Erlang)等人从研究电话系统时开始建立、发展起来的．在今天，它已成为广大工程技术人员、工商管理人员所必备的知识．它的应用遍及于通信、管理、计算机、信息等科学的各个领域．

随着计算机科学、信息科学的发展，排队论的内容也越来越丰富．如在本篇第8章里所介绍的矩阵解析方法就是计算技术与排队理论结合的产物，它架起了计算机计算与排队理论研究的桥梁，使排队论的研究更为活跃．另一方面，不断更新和丰富的排队理论，又使得其应用更为广泛．因此，排队论从它创始至今，一直都根植于实际，并以之为沃土不断发展与丰富自己．

1　排队论的基本概念

1.1　排队论三要素

排队论是研究服务系统中排队现象随机规律的一门运筹学分支，其组成的三要素为：

(1) **输入过程**　指各种类型的顾客按怎样的规律到来．

(2) **排队规则**　指到达的顾客按怎样的规定次序接受服务．

(3) **服务机构**　指同一时刻有多少服务设备可接纳顾客，每一设备可接纳多少顾客，以及对每一顾客服务多长时间．

随机因素对输入过程与服务时间起着根本性的影响，排队论也因之又名为**随机服务系统**理论．码头船只的装卸、机场飞机的降落、工人对自动机床的管理、电信局用户的通话、计算机系统对信息的处理都是随机服务系统的典型例子．

1.1.1　输入过程

实际中，可以有各式各样的输入过程，如

(1) 定长输入　即顾客有规则地等距到达．

(2) **最简单流，**或称**泊松(S. D. Poisson)输入，**它是满足下列四个条件的输入：

① 平稳性　在区间$[a, a+t)$内有k个顾客到达的概率与a无关，只与t, k有关，记为$v_k(t)$；

② 无后效性　不相交区间内到达的顾客数是相互独立的；

③ 普通性　令 $\psi(t)$ 表示在长为 t 的区间内至少到达两个顾客的概率，则

$$\lim_{t\to 0}\frac{\psi(t)}{t}=0;$$

④ 有限性　任意有限区间内到达有限个顾客的概率为 1.

关于简单流有下面的定理.

定理 1　对于最简单流，长为 t 的区间内到达 k 个顾客的概率 $v_k(t)$ 服从泊松分布，即

$$v_k(t)=\exp(-\lambda t)\frac{(\lambda t)^k}{k!}\qquad(k=0,1,2,\cdots),$$

其中 $\lambda>0$ 为常数，它代表单位时间内到达顾客的平均数，称为最简单流的参数.

定理 2　在输入过程中，令第 i 个顾客到达的时刻为 τ_i，$\tau_0=0$，并令

$$t_i=\tau_i-\tau_{i-1}\qquad(i=1,2,\cdots),$$

则此输入过程是参数为 λ 的最简单流的充分必要条件是相继顾客到达间隔 t_i，$i=1,2,\cdots$，相互独立，并具有相同的负指数分布

$$A(t)=P\{t_i\leqslant\tau\}=\begin{cases}1-\exp(-\lambda t) & (t\geqslant 0),\\ 0 & (t<0).\end{cases}$$

(3) 带变动参数的简单流　如果输入不具有平稳性，则在区间 $[a,a+t)$ 内有 k 个顾客到达的概率与起点 a 有关，记为 $v_k(t,a)$. 所谓带变动参数的简单流是指满足下列四个条件的输入：

① 对于任何 $a\geqslant 0$，极限

$$\lim_{t\to 0}\frac{1-v_0(t,a)}{t}=\lambda(a)$$

都存在，称为参数在时刻 a 的瞬时值；

② 无后效性　其定义与最简单流的相同；

③ 普通性　对于任何 $a\geqslant 0$，有

$$\lim_{t\to 0}\frac{1-v_0(t,a)-v_1(t,a)}{t}=0;$$

④ 有限性　其定义与最简单流的相同.

定理 3　对于带变动参数的简单流，区间 $[a,a+t)$ 内到达 k 个顾客的概率为

$$v_k(t,a)=\exp(-\Lambda(t,a))\frac{(\Lambda(t,a))^k}{k!}\qquad(k=0,1,2,\cdots),$$

其中

$$\Lambda(t,a)=\int_0^t\lambda(a+u)\mathrm{d}u.$$

(4) 埃尔朗输入　即到达间隔相互独立，并具有相同的埃尔朗分布密度

$$a(t)=\frac{\lambda(\lambda t)^{k-1}}{(k-1)!}\exp(-\lambda t)\qquad(t\geqslant 0)$$

的输入，其中 k 为正整数，称为埃尔朗输入的阶；$\lambda>0$ 为一常数. 用 E_k 表示 k 阶埃尔朗输入. 由定理 2，E_1 输入就是最简单流.

定理 4　设 $t_1,t_2,\cdots,t_k$ 为相互独立、具有相同负指数分布的随机变量，令

$$T_k = t_1 + t_2 + \cdots + t_k,$$

则 T_k 具有 k 阶埃尔朗分布 E_k.

(5) 超指数输入 H_k 即到达间隔相互独立,并具有相同的超指数分布密度

$$a(t) = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \lambda_i \exp(-\lambda_i t) \qquad (t \geqslant 0)$$

的输入,其中 $\lambda_i > 0$;$\alpha_i > 0, i = 1,2,\cdots,k$,且 $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 1$. k 为正整数,称为超指数输入的阶. 由定理 2, H_1 输入是最简单流.

(6) 一般独立输入 即相继顾客到达间隔相互独立相同分布的输入. 前面的定长输入、最简单流、埃尔朗输入、超指数输入都是一般独立输入的特例.

(7) 成批到达的输入 即假定有一系列到达点,到达点本身可以是上述各种输入,但在每一到达点上到来的不是单独一个顾客,而是一批顾客,每批顾客的数目 m 为一随机变量,其分布为

$$P\{m = k\} = a_k \quad (k = 1,2,\cdots).$$

(8) 到达间隔独立,但具有不同分布的输入 这种输入也称为带限定后效的流. 具有平稳性与普通性的带限定后效的流称为巴尔姆(Palm) 流.

1.1.2 排队规则

(1) 损失制 顾客到达时,若所有服务台均被占用,该顾客就自动消失.

(2) 等待制 顾客到达时,若所有服务台均被占用,他们就排成队伍,等待服务,服务次序可采用下列各种规则.

① 先到先服务 按到达次序接受服务.

② 后到先服务 如通信系统中,最后到达的信息一般说是最有价值的,因而可能采用"后到先服务"的方式.

③ 随机选择次序的服务 当服务机构得空时,在等待的顾客中随机地选取一名进行服务,也即每一等待的顾客被选到的概率相同.

④ 优先权服务 对某类顾客给予优先权,如长途电话比市内电话优先;急诊病人比普通病人优先等.

⑤ 多个(n 个) 服务台的情形 顾客可以排成一个公共的队,按次序接受服务;也可排成 n 个队,当第 m 个顾客到达时,以概率 $C_i^{(m)}$ 排入第 i 个队,

$$\sum_{i=1}^{n} C_i^{(m)} = 1 \qquad (m = 1,2,\cdots).$$

(3) 混合制 前述两种制式相结合的规则.

① 队长有限制的情形 顾客到达时,若队长 $< N$(给定的正整数),就排入队伍,若队长 $= N$,顾客就离去.

② 等待时间有限制的情形 顾客在队伍中的等待时间不能超过 T(给定的正数),超过 T 后顾客就立刻离去.

③ 逗留时间(等待时间与服务时间之和) 有限制的情形 如敌机飞越高射炮

射击区所需的时间为 T,若敌机飞过该区后还未被击落,就算逃逸.

1.1.3 服务机构

服务台的个数可以是一个、几个、甚至无穷多个(只要有足够多的服务台,使每一个顾客一到达,就能立即接受服务).服务可以是单个服务,也可以是成批服务.服务时间可以有如下各种分布.

(1) 定长分布　若每一顾客的服务时间 v 都是某一常数 $1/\mu(\mu > 0)$,则 v 的分布函数为

$$B(x) = P\{v \leqslant x\} = \begin{cases} 1 & (x \geqslant 1/\mu), \\ 0 & (x < 1/\mu). \end{cases}$$

(2) 负指数分布　各个顾客的服务时间相互独立,且具有相同的负指数分布,则

$$B(x) = \begin{cases} 1 - \exp(-\mu x) & (x \geqslant 0), \\ 0 & (x < 0), \end{cases}$$

其中 $\mu > 0$ 为一常数.

(3) k 阶埃尔朗分布 E_k　各个顾客的服务时间相互独立,且具有相同的埃尔朗分布,其密度函数为

$$b(x) = \frac{k\mu(k\mu x)^{k-1}}{(k-1)!}\exp(-k\mu x) \qquad (x \geqslant 0),$$

其中 k 为正整数;$\mu > 0$ 为一常数.$k = 1$ 时,埃尔朗分布 E_1 为负指数分布;$k \to \infty$ 时,埃尔朗分布为长度为 $1/\mu$ 的定长分布.

(4) k 阶超指数分布 H_k　各个顾客的服务时间相互独立,且具有相同的超指数分布,其密度函数为

$$b(x) = \sum_{i=1}^{k}\alpha_i\mu_i\exp(-\mu_i x) \qquad (x \geqslant 0),$$

其中 $\mu_i, \alpha_i > 0, i = 1, 2, \cdots, k, \sum_{i=1}^{k}\alpha_i = 1$.显然,超指数服务分布可以看成每个顾客依概率 α_i 接受参数为 μ_i 的负指数分布服务的情况.又显见,H_1 分布为负指数分布.

(5) 一般服务分布　所有顾客的服务时间相互独立,并为相同分布的随机变量,其分布函数记为 $B(x)$.前面所有的服务分布都是一般服务分布的特例.

(6) 多个服务台的情形　可以假定各个服务台的服务分布参数不同或分布类型不同.

(7) 服务时间依赖于队长的情形　这反映了服务员的心理:排队人数增多,服务速度就加快.

1.2 数量指标

随机服务系统最重要的数量指标有三类:等待时间、忙期、队长.

1. 等待时间

(1)(实)等待时间　第 m 个顾客的**等待时间** w_m，是从他到达时起到开始接受服务时止这段时间.

(2) 虚等待时间　在任意时刻 t 之后的到达不予考虑的情况下，从 t 开始到服务系统中至少有一服务台得空为止的时间 $w(t)$，称为(全)占用时间. 在先到先服务的规则下，$w(t)$ 为在 t 时刻到达的某个假想的顾客的等待时间(实际上在 t 时刻不一定有顾客到达)，因而称为**虚等待时间**.

2. 忙期

在服务系统中所有服务台都处于连续繁忙(都在进行服务)的时期称为**忙期**. 忙期的长度记为 d.

3. 队长

(1) 总队长(简称队长)　队长即系统中顾客的数目，它包括正在接受服务的与排队等待的顾客. 下面都以 $q(t)$ 表示时刻 t 的队长；q_m 表示第 m 个顾客到达瞬时所看到的队长，q'_m 表示第 m 个离开系统的顾客离开瞬时所留下的队长.

(2) 等待队长　正在排队等待的顾客数目称为等待队长.

1.3　系统分类的记号

后面均以下列字母代表各种输入与服务：M—— 最简单流或负指数分布；D—— 定长输入或分布；E_k——k 阶埃尔朗输入或分布；H_k——k 阶超指数输入或分布；GI—— 一般独立输入；G—— 一般服务分布.

以 $X/Y/n$ 代表输入为 X、服务为 Y 的 n 个服务台的系统. 例如，$D/M/1$ 表示定长输入、负指数服务分布的单台系统；$M/M/n$ 表示输入为最简单流、服务为负指数分布、n 个服务台的系统；$M/G/1$ 表示最简单流输入、一般服务分布的单台系统. 如果不附加其他说明，这种记号一般都指先到先服务、服务与输入独立、单个服务的等待制系统.

有时也用 $X/Y/n/N$ 代表队长不超过 $N(N \geqslant n)$ 的混合制 $X/Y/n$ 系统. 特别地，$X/Y/n/n$ 代表损失制的 $X/Y/n$ 系统，$X/Y/n/\infty$ 代表等待制的 $X/Y/n$ 系统.

2　M/M/· 系统

2.1　M/M/n 系统

假定有参数为 $\lambda(\lambda > 0)$ 的最简单流到达 $n(n \geqslant 1)$ 个服务台的系统. 顾客到达时，若有空的服务台，则该顾客立即接受服务；若所有服务台均在服务，则顾客排成一个队伍等待服务，服务次序任意，服务时间与到达间隔独立，并且服从参数为 $\mu(\mu > 0)$ 的负指数分布. 此系统即为 $M/M/n$ 系统.

令 $q(t)$ 为在时刻 t 的队长. 若 $q(t) = j \leqslant n$，则在时刻 t 有 j 个台正在进行服

务，而剩下的 $n-j$ 个台空着；若 $j>n$，则在时刻 t，所有 n 个台都在进行服务，并且有 $j-n$ 个顾客正在排队等待. j 的取值集合为 $\{0,1,2,\cdots\}$. 记

$$\rho=\frac{\lambda}{n\mu},$$

称其为服务强度，它表示每个台在单位时间内所增加的平均负荷，则对于 $M/M/n$ 系统，有下面的定理及推论.

定理1 对于 $M/M/n$ 系统，若 $\rho<1$，则队长 $q(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty}P\{q(t)=j\}=p_j \qquad (j=0,1,\cdots)$$

存在，与初始条件无关，且可表示为

$$p_j=\begin{cases}\dfrac{(n\rho)^j}{j!}p_0 & (j=1,2,\cdots,n-1),\\ \dfrac{(n\rho)^j}{n!\,n^{j-n}}p_0 & (j=n,n+1,\cdots),\end{cases}$$

其中，$p_0=\left(\sum_{j=0}^{n-1}\dfrac{(n\rho)^j}{j!}+\dfrac{(n\rho)^n}{n!}\dfrac{1}{1-\rho}\right)^{-1}$. 若 $\rho\geqslant 1$，则

$$\lim_{t\to\infty}P\{q(t)=j\}=0 \qquad (j=0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

推论1 在统计平衡(指已达到极限状态时)的 $M/M/n$ 系统中，顾客因所有服务台被占而需等待的概率为

$$\Pi=\sum_{j=n}^{\infty}p_j=\frac{(n\rho)^n}{n!}\frac{1}{1-\rho}p_0,$$

平均等待队长为

$$Eq_w=\sum_{j=1}^{\infty}jp_{n+j}=\frac{\rho}{1-\rho}\Pi,$$

平均队长为

$$Eq=\sum_{j=1}^{\infty}jp_j=Eq_w+n\rho,$$

其中 p_0 由定理1给出.

定理2 对于先到先服务 $M/M/n$ 系统，若 $\rho<1$，则在时刻 t 的虚等待时间 $w(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty}P\{w(t)\leqslant x\}=W(x)$$

存在，与初始条件无关，且可表示为

$$W(x)=\begin{cases}1-\dfrac{p_0}{1-\rho}\dfrac{(n\rho)^n}{n!}\exp(-(n\mu-\lambda)x) & (x\geqslant 0),\\ 0 & (x<0),\end{cases}$$

其中 p_0 如定理1中所给. 若 $\rho\geqslant 1$，则

$$\lim_{t\to\infty}P\{w(t)\leqslant x\}=0,$$

此时不为概率分布.

推论 2 对于统计平衡的先到先服务系统 $M/M/n$，其平均虚等待时间为

$$Ew = \frac{1}{(n\mu - \lambda)}\Pi,$$

其中 Π 由推论 1 给出.

下面考虑两个特殊的 $M/M/n$ 系统.

(1) $n = 1$ 的 **$M/M/1$ 系统** 对于此系统，

$$\rho = \frac{\lambda}{\mu}.$$

在 $\rho < 1$ 时，系统统计平衡，此时其队长分布为

$$p_j = (1 - \rho)\rho^j \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

顾客因服务台被占而需等待的概率为

$$\Pi = \sum_{j=1}^{\infty} p_j = \rho,$$

平均队长为

$$Eq = \frac{\rho}{1 - \rho},$$

平均等待队长为

$$Eq_w = \frac{\rho^2}{1 - \rho}.$$

对于先到先服务的统计平衡的 $M/M/1$ 系统，在 t 时刻的虚等待时间 $w(t)$ 的分布为

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = W(x) = \begin{cases} 1 - \rho\exp(-(\mu - \lambda)x) & (x \geqslant 0), \\ 0 & (x < 0); \end{cases}$$

平均虚等待时间为

$$Ew = \frac{\rho}{\mu - \lambda}.$$

(2) $n = \infty$ 的 **$M/M/\infty$ 系统** 此系统总是能统计平衡的，平衡时其队长的分布可表示为

$$p_j = \exp(-\lambda/\mu)\frac{(\lambda/\mu)^j}{j!} \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

平均队长为

$$Eq = \frac{\lambda}{\mu}.$$

2.2 $M/M/n/N$ 系统

假定有参数为 $\lambda(\lambda > 0)$ 的最简单流到达 n 个服务台的系统. 若顾客到达时有空闲的台，则立即接受服务；若顾客到达时所有 n 个台都已在进行服务，则当系统

中的顾客数(包括正在服务的 n 个顾客) < 指定数 $N(N \geqslant n)$ 时,新来的顾客排入队伍等待服务,而当系统中顾客数 $= N$ 时,新来的顾客就被拒绝而损失.假定服务次序任意,服务时间与输入独立,并且服从参数为 $\mu(>0)$ 的负指数分布.此系统即为 ***M/M/n/N* 系统**.

令 $q(t)$ 为 t 时刻系统的队长,其状态空间为 $\{0,1,2,\cdots,N\}$,记 $\rho=\dfrac{\lambda}{n\mu}$,则对于 $M/M/n/N$ 系统,有如下定理及推论.

定理 3 对于 $M/M/n/N$ 系统,队长的极限分布

$$\lim_{t\to\infty}P\{q(t)=j\}=p_j \qquad (j=0,1,\cdots,N)$$

存在,并与初始条件无关,且可表示为

$$p_j=\begin{cases}\dfrac{(n\rho)^j}{j!}p_0 & (j=1,2,\cdots,n-1),\\[2mm] \dfrac{(n\rho)^j}{n!\,n^{j-n}}p_0 & (j=n,n+1,\cdots,N),\end{cases}$$

其中
$$p_0=\left(\sum_{j=0}^{n-1}\frac{(n\rho)^j}{j!}+\sum_{j=n}^{N}\frac{(n\rho)^j}{n!\,n^{j-n}}\right)^{-1}.$$

特别地,当 $N=\infty$ 时,在 $\rho<1$ 条件下,以上各式均成立.

推论 3 在系统统计平衡时,顾客的损失概率为

$$\Pi=p_N=\frac{(n\rho)^N}{n!\,n^{N-n}}p_0,$$

顾客因所有服务台被占而需等待或损失的概率为

$$\sum_{j=n}^{N}p_j=\begin{cases}\dfrac{(n\rho)^n}{n!}\dfrac{1-\rho^{N-n+1}}{1-\rho}p_0 & (\rho\neq 1),\\[2mm] \dfrac{n^n(N-n+1)}{n!}p_0 & (\rho=1);\end{cases}$$

平均等待队长为

$$\begin{aligned}Eq_w&=\sum_{j=0}^{N-n}jp_{n+j}\\&=\begin{cases}\dfrac{(n\rho)^n\rho}{n!(1-\rho)^2}\left(1-(N-n+1)\rho^{N-n}+(N-n)\rho^{N-n+1}\right)p_0 & (\rho\neq 1),\\[2mm] \dfrac{n^n}{n!}\dfrac{(N-n+1)(N-n)}{2}p_0 & (\rho=1);\end{cases}\end{aligned}$$

平均队长为

$$Eq=Eq_w+\frac{\lambda}{\mu}(1-\Pi),$$

其中 p_0 由定理 3 给出.

定理 4 对于先到先服务的 $M/M/n/N$ 系统,若 $N<\infty$,则在时刻 t 到达的假想顾客未遭损失的条件下,它的虚等待时间 $\tilde{w}(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{\widetilde{w}(t) \leqslant x\} = \widetilde{W}(x)$$

存在,与初始条件无关,且有

$$\widetilde{W}(x) = \begin{cases} 1 - \dfrac{1}{1-\Pi}\dfrac{p_0}{1-\rho}\dfrac{(n\rho)^n}{n!}\exp(-n\mu x)\sum\limits_{i=0}^{N-n-1}\dfrac{(\lambda x)^i}{i!}(1-\rho^{N-n-i}) & (x \geqslant 0,\quad \rho \neq 1), \\ 1 - \dfrac{1}{1-\Pi}p_0\dfrac{n^n}{n!}\exp(-n\mu x)\sum\limits_{i=0}^{N-n-1}\dfrac{(\lambda x)^i}{i!}(N-n-i) & (x \geqslant 0,\quad \rho = 1), \\ 0 & (x < 0), \end{cases}$$

其中 p_0 由定理 3 给出,而 Π 由推论 3 给出,在求和号上限小于下限时,和值取为 0.

推论 4 对于统计平衡的 $M/M/n/N$ 系统($N < \infty$),在等待空间尚有空位的条件下,服务台全部被占的概率为

$$\widetilde{\Pi} = 1 - \widetilde{W}(0) = \begin{cases} \dfrac{1}{1-\Pi}\dfrac{p_0}{1-\rho}\dfrac{(n\rho)^n}{n!}(1-\rho^{N-n}) & (\rho \neq 1), \\ \dfrac{1}{1-\Pi}p_0\dfrac{n^n}{n!}(N-n) & (\rho = 1); \end{cases}$$

未遭损失的假想顾客的平均虚等待时间为

$$E\widetilde{w} = \begin{cases} \dfrac{1}{1-\Pi}\dfrac{p_0}{(1-\rho)^2}\dfrac{(n\rho)^n}{n!}\dfrac{1}{n\mu}(1-(N-n+1)\rho^{N-n}+(N-n)\rho^{N-n+1}) & (\rho \neq 1), \\ \dfrac{1}{1-\Pi}p_0\dfrac{n^n}{n!}\dfrac{1}{n\mu}\dfrac{(N-n+1)(N-n)}{2} & (\rho = 1), \end{cases}$$

其中 p_0,Π 分别由定理 3、推论 3 给出.

下面讨论两个特殊的 $M/M/n/N$ 系统.

(1) $N = \infty$ 的 $M/M/n$ 系统 此系统已在 2.1 节中详细讨论过.容易验证,此节中的结论与 2.1 节中所给出的相关结论是一致的.

(2) $N = n$ 的 $\boldsymbol{M/M/n/n}$ **系统** 统计平衡下,队长分布可简化表示为

$$p_j = \frac{(\lambda/\mu)^j/j!}{\sum\limits_{k=0}^{n}\dfrac{(\lambda/\mu)^k}{k!}} \quad (j = 0,1,\cdots,n).$$

此式称为**埃尔朗公式**.损失率可表示为

$$\Pi = p_n = \frac{\dfrac{(\lambda/\mu)^n}{n!}}{\sum\limits_{k=0}^{n}\dfrac{(\lambda/\mu)^k}{k!}},$$

平均占用的服务台数为

$$Eq = \frac{\lambda}{\mu}(1-\Pi).$$

2.3 顾客到达与离开时刻的性态

记 q_m 为第 m 个顾客到达瞬时所看到的队长,q'_m 为第 m 个离开系统的顾客(包

括服务完的与损失掉的都在内)离开瞬时所留下的队长,$q(t)$ 为任意时刻 t 系统的队长,则对于 $M/M/\cdot$ 系统,有下面的定理.

定理 5 对于上述各种 $M/M/\cdot$ 系统,恒有

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = \lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\},$$

极限值等于 p_j 或 0,分别由前面各系统有关的定理所决定,j 对于不同系统有不同的取值集合.

对于 $M/M/n$ 系统,令 w_m 为第 m 个顾客的等待时间,$w(t)$ 为时刻 t 系统的虚等待时间,则有下面的定理.

定理 6 对于先到先服务的 $M/M/n$ 系统,恒有

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = \lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} \qquad (-\infty < x < +\infty),$$

极限等于 $W(x)$ 或 0,由定理 2 所决定.

对于 $M/M/n/N(N < \infty)$ 系统,在顾客到达时未遭损失的条件下,记第 m 个未遭损失的顾客的等待时间为 $\tilde{w}_m$,记假想顾客的虚等待时间为 $\tilde{w}(t)$,则有下面的定理和推论.

定理 7 对于先到先服务的 $M/M/n/N$ 系统($N < \infty$),恒有

$$\lim_{m\to\infty} P\{\tilde{w}_m \leqslant x\} = \lim_{t\to\infty} P\{\tilde{w}(t) \leqslant x\} = \widetilde{W}(x) \qquad (-\infty < x < +\infty),$$

其中 $\widetilde{W}(x)$ 由定理 4 所给定.

推论 5 对于统计平衡的 $M/M/n/N$ 系统($N < \infty$),顾客到达时在未遭损失的条件下需要等待的概率 $\widehat{\widetilde{\Pi}} = \widetilde{\Pi}$,此处 $\widetilde{\Pi}$ 由推论 4 所给定.未遭损失的顾客的平均等待时间 $E\hat{\tilde{w}} = E\tilde{w}$,其中 $E\tilde{w}$ 亦由推论 4 所给出.

3 $GI/E_k/1$ 及有关的系统

3.1 $GI/E_k/1$ 系统

考虑到达间隔分布为 $A(x)$、均值为 $1/\lambda(\lambda > 0)$ 的一般独立输入,服务时间与输入相互独立,且分布 $B(x)$ 为均值 $1/\mu(\mu > 0)$ 的 k 阶埃尔朗分布 E_k,有单服务台的等待制系统.服务次序在讨论队长与忙期时不需作任何规定,但在讨论等待时间分布时假定为先到先服务.此系统即为 $GI/E_k/1$ 系统.令 $\rho = \dfrac{\lambda}{\mu}$,则对于这样的系统,有下面的定理及推论.

定理 1 对于 $GI/E_k/1$ 系统,若 $\rho < 1$,则队长 q_m 与 q'_m 的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等,即

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = \hat{p}_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在,且

$$\hat{p}_j = \begin{cases} \hat{g}_0 & (j = 0), \\ \sum_{i=(j-1)k+1}^{jk} \hat{g}_i & (j = 1,2,\cdots), \end{cases}$$

其中$\{\hat{g}_i\}$为具有母函数

$$\sum_{i=0}^{\infty} \hat{g}_i z^i = \prod_{i=1}^{k} \left(\frac{1-\theta_i}{1-z\theta_i} \right) \qquad (|z| < 1)$$

的概率分布;$\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_k$为方程

$$z^k = A^*(k\mu(1-z))$$

在单位圆$|z|<1$内的k个根;$A^*(s)$为到达间隔分布$A(x)$的**L-S变换**.若$\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = 0 \qquad (j = 0,1,2,\cdots).$$

此时不为概率分布.

推论 1 在统计平衡 $GI/E_k/1$ 系统中,顾客到达时遇到服务台被占而需等待的概率为

$$\hat{\Pi} = 1 - \hat{p}_0 = 1 - \prod_{i=1}^{k} (1-\theta_i).$$

其中$\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_k$的含义同定理1.

定理 2 对于 $GI/E_k/1$ 系统,若$\rho < 1$,则等待时间w_m的极限分布

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = \hat{W}(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,与初始条件无关,且其 L-S 变换为

$$\hat{W}^*(s) = \prod_{i=1}^{k} \left(\frac{(1-\theta_i)(k\mu+s)}{k\mu(1-\theta_i)+s} \right) \qquad (\mathrm{Re}(s) > 0),$$

其中$\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_k$的含义同定理1.若$\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

推论 2 在统计平衡 $GI/E_k/1$ 系统中,到达顾客需要等待的概率$\hat{\Pi}$、顾客的平均等待时间$\widehat{Ew}$分别为

$$\hat{\Pi} = 1 - \hat{W}(0) = 1 - \hat{W}^*(\infty) = 1 - \prod_{i=1}^{k} (1-\theta_i),$$

$$\widehat{Ew} = \sum_{i=1}^{k} \frac{\theta_i}{k\mu(1-\theta_i)},$$

其中$\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_k$含义同定理1.

定理 3 对于 $GI/E_k/1$ 系统,若$\rho < 1$,且$A(x)$为非格子点分布,则队长$q(t)$

的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = p_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在,与初始分布无关,且

$$p_j = \begin{cases} 1-\rho & (j=0), \\ \lambda\int_{0-}^{\infty}(A^{(j-1)}(x) - A^{(j)}(x))\mathrm{d}_x(\widehat{W}(x) * \\ \int_0^x \sum_{i=0}^{k-1}\exp(-k\mu u)\dfrac{(k\mu u)^i}{i!}\mathrm{d}u) & (j = 1,2,\cdots), \end{cases}$$

其中 $A^{(j)}(x)$ 为 $A(x)$ 的 j 重卷积; * 为卷积运算; $\widehat{W}(x)$ 为等待时间 w_m 的极限分布,由定理 2 唯一确定.

若 $\rho < 1$,但 $A(x)$ 为格子点分布,则队长 $q(t)$ 的分布,当 $t \to \infty$ 时极限不存在.

若 $\rho > 1$,或 $\rho = 1$,但 $A(x)$ 与 $B(x)$ 不全为定长分布,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = 0 \qquad (j = 0,1,2,\cdots).$$

若 $\rho = 1$,且 $A(x)$ 与 $B(x)$ 全为定长分布,则极限

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\}$$

存在,但与初始条件有关.

推论 3　对于统计平衡的 $GI/E_k/1$ 系统,任意时刻服务台被占的概率为 $\Pi = 1 - p_0 = \rho$,任意时刻的平均队长为

$$Eq = \rho + \lambda \widehat{Ew},$$

其中 $\widehat{Ew}$ 由推论 2 给出.

定理 4　对于 $GI/E_k/1$ 系统,若 $\rho < 1$,且 $A(x)$ 为非格子点分布,则虚等待时间 $w(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = W(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,与初始条件无关,且可表示为

$$W(x) = 1 - \rho + \lambda\int_0^x \widehat{W}(x-u)\sum_{i=0}^{k-1}\exp(-k\mu u)\frac{(k\mu u)^i}{i!}\mathrm{d}u \qquad (x \geqslant 0),$$

其中 $\widehat{W}(x)$ 由定理 2 唯一确定.

若 $\rho < 1$,但 $A(x)$ 为格子点分布,则当 $t \to \infty$ 时,虚等待时间 $w(t)$ 的分布极限不存在.

若 $\rho > 1$,或 $\rho = 1$,但 $A(x)$ 与 $B(x)$ 不全为定长分布,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = 0.$$

若 $\rho = 1$,且 $A(x)$ 与 $B(x)$ 全为定长分布,则极限 $\lim\limits_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\}$ 不存在.

推论 4　对于统计平衡的 $GI/E_k/1$ 系统,平均虚等待时间为

$$Ew = \rho\left(\frac{k+1}{2k\mu} + \sum_{i=1}^{k}\frac{\theta_i}{k\mu(1-\theta_i)}\right),$$

其中 $\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_k$ 含义同定理 1.

定理 5 对于 $GI/E_k/1$ 系统,忙期长度 d 的分布 $D(x)$ 的 L-S 变换为

$$D^*(s)=1-\frac{1-\left(\frac{k\mu}{k\mu+s}\right)^k}{\prod_{i=1}^{k}\left(1-\frac{k\mu}{k\mu+s}f_i(s)\right)}\qquad(\mathrm{Re}(s)>0),$$

其中 $f_1(s),f_2(s),\cdots,f_k(s)$ 为当 $\mathrm{Re}(s)>0$ 时方程

$$z^k=A^*(s+k\mu(1-z))$$

在单位圆 $|z|<1$ 内的 k 个根,$A^*(s)$ 为 $A(x)$ 的 L-S 变换.

推论 5 若 $\rho\leqslant 1$,则 $D(\infty)=1$,即 $D(x)$ 为真正的概率分布.若 $\rho>1$,则

$$D(\infty)=1-\frac{k(\rho-1)}{\rho\prod_{i=1}^{k-1}(1-\theta_i)}<1,$$

表明忙期长度为无穷的概率

$$\Pi_d=\frac{k(\rho-1)}{\rho\prod_{i=1}^{k-1}(1-\theta_i)}>0,$$

其中 $\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_{k-1}$ 为当 $\rho>1$ 时方程 $z^k=A^*(k\mu(1-z))$ 在单位圆 $|z|<1$ 内的根,而当连乘积符号 $\prod_{i=1}^{k-1}$ 的上标小于下标时整个连乘积取值为 1.

3.2 $GI/M/1$ 系统与 $D/M/1$ 系统

这一节将讨论 $GI/E_k/1$ 系统的两个特例:$GI/M/1$ 系统和 $D/M/1$ 系统.

3.2.1 $GI/M/1$ 系统

用参数为 $\mu(\mu>0)$ 的负指数分布代替 $GI/E_k/1$ 系统中的 E_k 分布,即得 $GI/M/1$ 系统.对于 $GI/M/1$ 系统,对应于 3.1 节中的结论有如下简化的结论.

(1) 若 $\rho<1$,则队长 q_m 与 q'_m 的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等,即

$$\lim_{m\to\infty}P\{q_m=j\}=\lim_{m\to\infty}P\{q'_m=j\}=\hat{p}_j\qquad(j=0,1,2,\cdots)$$

存在,且

$$\hat{p}_j=(1-\theta)\theta^j\qquad(j=0,1,\cdots),$$

其中 θ 为方程 $z=A^*(\mu(1-z))$ 在 $(0,1)$ 内的唯一解,而 $A^*(s)$ 为分布 $A(x)$ 的 L-S 变换.

若 $\rho\geqslant 1$,则

$$\lim_{m\to\infty}P\{q_m=j\}=\lim_{m\to\infty}P\{q'_m=j\}=0\qquad(j=0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

在系统平衡时,顾客到达时遇到服务台被占而需等待的概率为

$$\widehat{\Pi} = 1 - \widehat{p}_0 = \theta;$$

顾客到达瞬时所看到的和离开瞬时所留下的平均队长均为

$$E\widehat{q} = \sum_{j=1}^{\infty} j\widehat{p}_j = \frac{\theta}{1-\theta};$$

顾客到达瞬时所看到的和离开瞬时所留下的平均等待队长均为

$$E\widehat{q}_w = \sum_{j=1}^{\infty} j\widehat{p}_{j+1} = \frac{\theta^2}{1-\theta}.$$

(2) 若 $\rho < 1$，且 $A(x)$ 为非格子点分布，则队长 $q(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = p_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在，并与初始分布无关，且

$$p_j = \begin{cases} 1-\rho & (j=0), \\ \rho(1-\theta)\theta^{j-1} & (j=1,2,\cdots). \end{cases}$$

若 $\rho < 1$，但 $A(x)$ 为周期 l 的格子点分布，则队长 $q(t)$ 的极限分布不存在，但对于任一 $\tau, 0 \leqslant \tau < l$，有

$$\lim_{m\to\infty} P\{q(ml+\tau) = j\} = \begin{cases} 1-\rho(\tau) & (j=0), \\ \rho(\tau)(1-\theta)\theta^{j-1} & (j=1,2,\cdots), \end{cases}$$

且与初始条件无关，其中

$$\rho(\tau) = \rho\exp(-\tau\mu(1-\theta))\frac{l\mu(1-\theta)}{1-\exp(-l\mu(1-\theta))}.$$

若 $\rho \geqslant 1$，则

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = 0 \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

在 $\rho < 1$ 时，若 $A(x)$ 为非格子点分布，则极限分布 $\{p_j\}$ 与 $\{\widehat{p}_j\}$ 存在如下关系：

$$p_j = \begin{cases} 1-\rho & (j=0), \\ \rho\widehat{p}_{j-1} & (j=1,2,\cdots). \end{cases}$$

在系统平衡时，任意时刻服务台被占的概率为

$$\Pi = 1 - p_0 = \rho;$$

任意时刻的平均队长为

$$Eq = \sum_{j=1}^{\infty} jp_j = \frac{\rho}{1-\theta};$$

任意时刻的等待队长为

$$Eq_w = \sum_{j=1}^{\infty} jp_{j+1} = \frac{\rho\theta}{1-\theta}.$$

(3) 若 $\rho < 1$，则等待时间 w_m 的极限分布

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = \widehat{W}(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在，与初始条件无关，且

$$\widehat{W}(x) = 1 - \theta\exp(-\mu(1-\theta)x) \qquad (x \geqslant 0).$$

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

在系统平衡时,到达的顾客需要等待的概率为

$$\widehat{\Pi} = 1 - \widehat{W}(0) = \theta;$$

顾客的平均等待时间为

$$E\widehat{w} = \frac{\theta}{\mu(1-\theta)}.$$

(4) 若 $\rho < 1$,且 $A(x)$ 为非格子点分布,则虚等待时间 $w(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = W(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,与初始条件无关,且

$$W(x) = 1 - \rho\exp(-\mu(1-\theta)x) \qquad (x \geqslant 0).$$

若 $\rho < 1$,但 $A(x)$ 是周期为 l 的格子点分布,则虚等待时间 $w(t)$ 的极限分布不存在,但对于任一 $\tau, 0 \leqslant \tau < l$,有

$$\lim_{m\to\infty} P\{w(ml+\tau) \leqslant x\} = 1 - \rho(\tau)\exp(-\mu(1-\theta)x) \qquad (x \geqslant 0),$$

且与初始条件无关.

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

在系统平衡时,任意时刻服务台被占的概率为

$$\Pi = 1 - W(0) = \rho;$$

平均虚等待时间为

$$Ew = \frac{\rho}{\mu(1-\theta)}.$$

(5) 系统 $GI/M/1$ 忙期长度 d 的分布 $D(x)$ 的 L-S 变换为

$$D^*(s) = \frac{\mu(1-f(s))}{s+\mu(1-f(s))} \qquad (\mathrm{Re}(s) > 0),$$

其中 $f(s)$ 为当 $\mathrm{Re}(s) > 0$ 时方程 $z = A^*(s+\mu(1-z))$ 在单位圆 $|z| < 1$ 内的唯一解.从而,$D(x)$ 可表示为

$$D(x) = \sum_{j=1}^{\infty}\exp(-\mu x)\frac{(\mu x)^{j-1}}{j!}\int_0^x (1 - A^{(j)}(u))u\,\mathrm{d}u \qquad (x \geqslant 0).$$

若 $\rho \leqslant 1$,则 $D(\infty) = 1$,即 $D(x)$ 为真正的概率分布,而忙期的平均长度为

$$Ed = \begin{cases} \dfrac{1}{\mu(1-\theta)} & (\rho < 1); \\ \infty & (\rho = 1). \end{cases}$$

若 $\rho > 1$,则

$$D(\infty)=\frac{1}{\rho}<1,$$

即忙期长度为无穷的概率为 $\Pi_d=1-\dfrac{1}{\rho}>0$.

3.2.2　$D/M/1$ 系统

用间隔为 $1/\lambda(\lambda>0)$ 的定长输入代替3.2.1节中 $GI/M/1$ 系统的一般输入,即得 $D/M/1$ 系统.对于 $D/M/1$ 系统,有下面更为简单的结论.

(1) 若 $\rho<1$,则队长 q_m 与 q'_m 的极限分布均存在,且相等,并与初始条件无关,即

$$\lim_{m\to\infty}P\{q_m=j\}=\lim_{m\to\infty}P\{q'_m=j\}=\widehat{p}_j\qquad(j=0,1,2,\cdots)$$

存在,且

$$\widehat{p}_j=(1-\theta)\theta^j\qquad(j=0,1,2,\cdots),$$

其中 θ 为方程 $z=1+\rho\ln z$ 在(0,1)内的唯一解.

若 $\rho\geqslant1$,则

$$\lim_{m\to\infty}P\{q_m=j\}=\lim_{m\to\infty}P\{q'_m=j\}=0\qquad(j=0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

在系统平衡时,顾客到达时遇到服务台被占而需等待的概率为

$$\widehat{\Pi}=1-\widehat{p}_0=\theta;$$

顾客到达瞬时所看到的和离开瞬时所留下的平均队长均为

$$E\widehat{q}=\sum_{j=1}^{\infty}j\widehat{p}_j=\frac{\theta}{1-\theta},$$

而平均等待队长均为

$$E\widehat{q}_w=\sum_{j=1}^{\infty}j\widehat{p}_{j+1}=\frac{\theta^2}{1-\theta}.$$

(2) 若 $\rho<1$,则队长 $q(t)$ 的极限分布不存在,但对于任一 $\tau,0\leqslant\tau<1/\lambda$,有

$$\lim_{m\to\infty}P\left\{q\left(\frac{m}{\lambda}+\tau\right)=j\right\}=\begin{cases}1-\exp(-\mu\tau(1-\theta)) & (j=0),\\ \exp(-\mu\tau(1-\theta))(1-\theta)\theta^{j-1} & (j=1,2,3,\cdots)\end{cases}$$

存在,且与初始条件无关.

若 $\rho\geqslant1$,则

$$\lim_{m\to\infty}P\{q(t)=j\}=0\qquad(j=0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

(3) 若 $\rho<1$,则等待时间 w_m 的极限分布

$$\lim_{m\to\infty}P\{w_m\leqslant x\}=\widehat{W}(x)\qquad(x\geqslant0)$$

存在,与初始条件无关,且

$$\widehat{W}(x)=1-\theta\exp(-\mu(1-\theta)x)\qquad(x\geqslant0).$$

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

在系统平衡时,到达顾客需要等待的概率为

$$\hat{\Pi} = 1 - \hat{W}(0) = \theta,$$

顾客的平均等待时间为

$$E\hat{W} = \frac{\theta}{\mu(1-\theta)}.$$

(4) 若 $\rho < 1$,则虚等待时间 $w(t)$ 的极限分布不存在,但对于任一 $\tau, 0 \leqslant \tau < 1/\lambda$,极限

$$\lim_{m\to\infty} P\{w(\frac{m}{\lambda} + \tau) \leqslant x\} = 1 - \exp(-\mu(1-\theta)(\tau + x)) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,且与初始条件无关.

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

(5) 系统 $D/M/1$ 的忙期长度 d 的分布 $D(x)$ 的 L-S 变换为

$$D^*(s) = \frac{\mu(1 - f(s))}{s + \mu(1 - f(s))} \qquad (\mathrm{Re}(s) > 0),$$

其中 $f(s)$ 为当 $\mathrm{Re}(s) > 0$ 时方程

$$z = 1 + \frac{s}{\mu} + \rho \ln z$$

在单位圆 $|z| < 1$ 内的唯一解.

若 $\rho \leqslant 1$,则 $D(\infty) = 1$,即 $D(x)$ 为真正的概率分布,而忙期平均长度为

$$Ed = \begin{cases} \dfrac{1}{\mu(1-\theta)} & (\rho < 1), \\ \infty & (\rho = 1). \end{cases}$$

若 $\rho > 1$,则 $D(\infty) = \frac{1}{\rho} < 1$,即忙期长度为无穷的概率为

$$\Pi_d = 1 - \frac{1}{\rho} > 0.$$

4 $E_k/G/1$ 及有关的系统

4.1 $E_k/G/1$ 系统

考虑输入是均值 $\frac{k}{\lambda}(\lambda > 0)$ 的 k 阶埃尔朗输入 E_k,服务时间与输入相互独立,

且分布是均值为 $\frac{1}{\mu}$ $(\mu > 0)$ 的一般分布 $B(x)$,有单服务台的等待制系统.服务次序在讨论队长与忙期时不需作任何规定,但在讨论等待时间分布时假定为先到先服务.此系统即为 $\boldsymbol{E_k/G/1}$ 系统.令 $\rho = \frac{\lambda}{k\mu}$,则对于 $E_k/G/1$ 系统,有下面的定理和推论.

定理 1　对于 $E_k/G/1$ 系统,若 $\rho < 1$,则队长 q_m 与 q'_m 的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等.即

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = \widehat{p}_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在,且

$$\widehat{p}_j = \sum_{i=jk}^{(j+1)k-1} \widehat{g}_i \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

其中 $\{\widehat{g}_j\}$ 为具有母函数

$$\sum_{i=0}^{\infty} \widehat{g}_i z^i = \frac{(1-\rho)(1-z)B^*(\lambda(1-z))}{B^*(\lambda(1-z)) - z^k} k \prod_{i=1}^{k-1}\left(\frac{z-\omega_i}{1-\omega_i}\right) \qquad (|z| < 1)$$

的概率分布;$B^*(s)$ 为服务时间分布 $B(x)$ 的 L-S 变换;$\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_{k-1}$ 为方程 $z^k = B^*(\lambda(1-z))$ 在单位圆 $|z| < 1$ 内的根,而当连乘积符号 $\prod_{i=1}^{k-1}$ 的上标小于下标时整个连乘积取值为 1.

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = 0 \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

定理 2　对于 $E_k/G/1$ 系统,若 $\rho < 1$,则队长 $q(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = p_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在,与初始条件无关,且

$$p_j = \begin{cases} \dfrac{1}{k}(k\widehat{g}_0 + (k-1)\widehat{g}_1 + \cdots + \widehat{g}_{k-1}) & (j = 0); \\ \dfrac{1}{k}(\widehat{g}_{(j-1)k+1} + 2\widehat{g}_{(j-1)k+2} + \cdots + k\widehat{g}_{jk} + (k-1)\widehat{g}_{jk+1} + \cdots + \widehat{g}_{(j+1)k-1}) & (j = 1,2,\cdots), \end{cases}$$

其中概率分布 $\{\widehat{g}_i\}$ 的定义同定理 1.若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = 0 \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

定理 3　对于 $E_k/G/1$ 系统,若 $\rho < 1$,则等待时间 w_m 的极限分布

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = \widehat{W}(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,与初始条件无关,且其 L-S 变换为

$$\widehat{W}^*(s)=\frac{(1-\rho)ks\lambda^{k-1}\prod_{i=1}^{k-1}\left(1-\frac{s}{\lambda(1-\omega_i)}\right)}{\lambda^k B^*(s)-(\lambda-s)^k}\qquad(\mathrm{Re}(s)>0),$$

其中 $\omega_1,\omega_2,\cdots,\omega_{k-1}$ 的含义同定理 1. 若 $\rho\geqslant 1$,则

$$\lim_{m\to\infty}P\{w_m\leqslant x\}=0,$$

此时不为概率分布.

推论 1　在系统平衡时,到达顾客需要等待的概率为

$$\widehat{\Pi}=1-\frac{k(1-\rho)}{\prod_{i=1}^{k-1}(1-\omega_i)}.$$

定理 4　对于 $E_k/G/1$ 系统,若 $\rho<1$,则虚等待时间 $w(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty}P\{w(t)\leqslant x\}=W(x)\qquad(x\geqslant 0)$$

存在,与初始条件无关,且其 L-S 变换为

$$W^*(s)=(1-\rho)\left(1-\frac{\lambda^k(1-B^*(s))}{\lambda^k B^*(s)-(\lambda-s)^k}\prod_{i=1}^{k-1}\left(1-\frac{s}{\lambda(1-\omega_i)}\right)\right)\qquad(\mathrm{Re}(s)>0),$$

其中 $B^*(s),\omega_1,\omega_2,\cdots,\omega_{k-1}$ 的含义同定理 1. 若 $\rho\geqslant 1$,则

$$\lim_{t\to\infty}P\{w(t)\leqslant x\}=0.$$

此时不为概率分布.

推论 2　在平衡 $E_k/G/1$ 系统中,任意时刻服务台被占的概率为

$$\Pi=1-W(0)=1-W^*(\infty)=\rho.$$

定理 5　对于 $E_k/G/1$ 系统,忙期长度 d 的分布函数 $D(x)$ 的 L-S 变换为

$$D^*(s)=1-\prod_{i=1}^{k}[1-h_i(s)]\qquad(\mathrm{Re}(s)>0),$$

其中 $h_1(s),h_2(s),\cdots,h_k(s)$ 为在 $\mathrm{Re}(s)>0$ 时方程 $z^k=B^*(s+\lambda(1-z))$ 在单位圆 $|z|<1$ 内的 k 个根,$B^*(s)$ 为服务时间分布 $B(x)$ 的 L-S 变换.

推论 3　若 $\rho\leqslant 1$,则 $D(\infty)=1$,即 $D(x)$ 为真正的概率分布.

若 $\rho>1$,则

$$D(\infty)=1-\prod_{i=1}^{k}(1-\omega_i)<1,$$

即忙期长度为无穷的概率为

$$\prod_{i=1}^{k}(1-\omega_i)>0,$$

其中 $\omega_1,\omega_2,\cdots,\omega_k$ 为当 $\rho>1$ 时方程

$$z^k=B^*(\lambda(1-z))$$

在单位圆 $|z|<1$ 内的 k 个根.

4.2 M/G/1系统与M/D/1系统

现在来讨论 $E_k/G/1$ 系统的两个特例:**M/G/1 系统**和 **M/D/1 系统**.

4.2.1 M/G/1 系统

用参数为 $\lambda(\lambda > 0)$ 的泊松过程代替 $E_k/G/1$ 系统中的 k 阶埃尔朗输入过程,即得 $M/G/1$ 系统.对于此系统,有下面的简化结论.

(1) 若 $\rho < 1$,则队长 $q(t)$,q_m 与 q'_m 的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等,即

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\}$$
$$= \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = p_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在,且其母函数为

$$Q(z) = \sum_{j=0}^{\infty} p_j z^j = \frac{(1-\rho)(1-z)B^*(\lambda(1-z))}{B^*(\lambda(1-z)) - z} \qquad (|z| < 1), \quad (4\text{-}1)$$

其中 $B^*(s)$ 为服务时间分布 $B(x)$ 的 L-S 变换.

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\}$$
$$= \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = 0 \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

在平衡的 $M/G/1$ 系统中,顾客到达时遇到服务台被占而需等待的概率 $\hat{\Pi}$ 与任意时刻服务台被占的概率 Π 相等,且

$$\hat{\Pi} = \Pi = 1 - p_0 = 1 - Q(0) = \rho.$$

任意时刻,顾客到达前瞬时以及离开后瞬时的平均队长均为

$$Eq = \sum_{j=1}^{\infty} jp_j = \rho + \frac{\rho^2 + \lambda^2\sigma_v^2}{2(1-\rho)}, \qquad (4\text{-}2)$$

其中 σ_v^2 为服务时间的方差.

任意时刻,顾客到达前瞬时以及离开后瞬时的平均等待队长均为

$$Eq_w = \sum_{j=1}^{\infty} jp_{j+1} = Eq - \rho = \frac{\rho^2 + \lambda^2\sigma_v^2}{2(1-\rho)},$$

其中 σ_v^2 为服务时间的方差. 称式(4-1)和式(4-2)为**扑拉切克-欣钦(Pollaczek-Khinchin)公式**.

(2) 若 $\rho < 1$,则虚等待时间 $w(t)$ 与等待时间 w_m 的极限分布均存在且相等,并与初始条件无关,即

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = \lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = W(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,且 $W(x)$ 的 L-S 变换为

$$W^*(s) = \frac{(1-\rho)s}{s-\lambda+\lambda B^*(s)} \qquad (\mathrm{Re}(s)>0), \tag{4-3}$$

其中 $B^*(s)$ 为服务时间分布 $B(x)$ 的 L-S 变换.

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = \lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

在平衡的 $M/G/1$ 系统中,顾客到达时需要等待的概率 $\hat{\Pi}$ 与任意时刻服务台被占的概率 Π 相等,均为

$$\hat{\Pi} = \Pi = 1 - W(0) = 1 - W^*(\infty) = \rho;$$

平均等待时间 $E\hat{w}$ 与平均虚等待时间 Ew 相等,均为

$$E\hat{w} = Ew = \frac{\rho^2 + \lambda^2\sigma_v^2}{2\lambda(1-\rho)}, \tag{4-4}$$

其中 σ_v^2 为服务时间的方差.也称式(4-3)和式(4-4)为**扑拉切克 - 欣钦公式**.

(3) 系统 $M/G/1$ 忙期长度 d 的分布 $D(x)$ 的 L-S 变换为

$$D^*(s) = h(s) \qquad (\mathrm{Re}(s) > 0),$$

其中 $h(s)$ 为 $\mathrm{Re}(s) > 0$ 时方程 $z = B^*(s + \lambda(1-z))$ 在 $|z| < 1$ 内的唯一解.

若 $\rho \leqslant 1$,则 $D(\infty) = 1$,即 $D(x)$ 为真正的概率分布,而忙期长度为

$$Ed = \begin{cases} \dfrac{1}{\mu-\lambda} & (\rho < 1), \\ \infty & (\rho = 1). \end{cases}$$

若 $\rho > 1$,则 $D(\infty) = \omega < 1$,即忙期长度为无穷的概率等于 $1-\omega > 0$,其中 ω 为方程 $z = B^*(\lambda(1-z))$ 在(0,1)内的唯一解,$B^*(s)$ 为服务时间分布 $B(x)$ 的 L-S 变换.

4.2.2　$M/D/1$ 系统

用长度为 $1/\mu(\mu > 0)$ 的定长分布代替 4.2.1 小节中 $M/G/1$ 系统的服务时间的一般分布,即得 $M/D/1$ 系统.对于 $M/D/1$ 系统,有下面更为简化的结论.

(1) 若 $\rho < 1$,则队长 $q(t)$, q_m 与 q'_m 的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等,即

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = p_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots).$$

队长极限分布的母函数为

$$Q(z) = \sum_{j=0}^{\infty} p_j z^j = \frac{(1-\rho)(1-z)}{1 - z e^{\rho(1-z)}} \qquad (|z| < 1).$$

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = 0,$$

此时不为概率分布.

在平衡的 $M/D/1$ 系统中,顾客到达时遇到服务台被占而需等待的概率 $\hat{\Pi}$ 与任

意时刻服务台被占的概率 Π 相等,均为

$$\hat{\Pi} = \Pi = 1 - p_0 = \rho.$$

任意时刻,顾客到达前瞬时以及离开后瞬时的平均队长均为

$$Eq = \frac{\rho(2-\rho)}{2(1-\rho)},$$

平均等待队长均为

$$Eq_w = Eq - \rho = \frac{\rho^2}{2(1-\rho)}.$$

(2) 若 $\rho < 1$,则虚等待时间 $w(t)$ 与等待时间 w_m 的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等,即

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = \lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = W(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,且 $W(x)$ 的 L-S 变换为

$$W^*(s) = \frac{(1-\rho)s}{s - \lambda + \lambda\exp\left(-\frac{s}{\mu}\right)} \qquad (\mathrm{Re}(s) > 0).$$

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = \lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

在平衡的 $M/D/1$ 系统中,顾客到达时需要等待的概率 $\hat{\Pi}$ 与任意时刻服务台被占的概率 Π 相等,且均为

$$\hat{\Pi} = \Pi = 1 - W(0) = 1 - W^*(\infty) = \rho;$$

平均等待时间 $E\hat{w}$ 与平均虚等待时间 Ew 相等,且均为

$$E\hat{w} = Ew = \frac{\rho}{2\mu(1-\rho)}.$$

(3) $M/D/1$ 系统的忙期 d 的分布 $D(x)$ 的 L-S 变换为

$$D^*(s) = h(s) \qquad (\mathrm{Re}(s) > 0),$$

其中 $h(s)$ 为在 $\mathrm{Re}(s) > 0$ 时方程

$$z = 1 + \frac{s}{\lambda} + \frac{1}{\rho}\ln z$$

在单位圆 $|z| < 1$ 内的唯一解.

若 $\rho \leqslant 1$,则 $D(\infty) = 1$,即 $D(x)$ 为真正的概率分布,而忙期平均长度为

$$Ed = \begin{cases} \dfrac{1}{\mu - \lambda} & (\rho < 1), \\ \infty & (\rho = 1). \end{cases}$$

若 $\rho > 1$,则 $D(\infty) = \omega < 1$,即忙期长度为无穷的概率等于 $1 - \omega > 0$,其中 ω 为方程

$$z = 1 + \frac{1}{\rho}\ln z$$

在(0,1)内的唯一解.

5 GI/M/n, GI/M/n/n 与 M/G/n/n 系统

5.1 GI/M/n 系统

考虑输入间隔分布为 $A(x)$,均值为 $1/\lambda(\lambda > 0)$ 的一般独立输入;服务时间与输入独立,且分布是参数为 $\mu(\mu > 0)$ 的负指数分布;有 n 个服务台的等待制系统.服务次序在讨论队长与忙期时不作任何规定,但在讨论等待时间分布时假定为先来先服务,此系统即为 ***GI/M/n* 系统**.令 $\rho = \dfrac{\lambda}{n\mu}$,则对于 $GI/M/n$ 系统,有下面的定理和推论.

定理 1 对于 $GI/M/n$ 系统,若 $\rho < 1$,则队长 q_m 与 q'_m 的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等.即

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = \widehat{p}_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在,且可表示为

$$\widehat{p}_j = \begin{cases} \sum_{r=j}^{n-1}(-1)^{r-j}\binom{r}{j}U_r & (j = 0,1,\cdots,n-1), \\ K\theta^{j-n} & (j = n,n+1,\cdots), \end{cases}$$

其中

$$U_r = KC_r\sum_{i=r+1}^{n}\frac{\binom{n}{i}}{C_i(1-A^*(i\mu))}\;\frac{n(1-A^*(i\mu))-i}{n(1-\theta)-i} \qquad (r = 0,1,\cdots,n-1);$$

$$K = \left(\frac{1}{1-\theta} + \sum_{i=1}^{n}\frac{\binom{n}{i}}{C_i(1-A^*(i\mu))}\;\frac{n(1-A^*(i\mu))-i}{n(1-\theta)-i}\right)^{-1};$$

$$C_0 = 1;\quad C_i = \prod_{l=1}^{i}\frac{A^*(l\mu)}{1-A^*(l\mu)} \qquad (i = 1,2,\cdots,n);$$

$A^*(s)$ 为到达间隔分布 $A(x)$ 的 L-S 变换;θ 为方程 $z = A^*(n\mu(1-z))$ 在(0,1)内的唯一解.

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = 0 \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

推论 1 在平衡 $GI/M/n$ 系统中,顾客到达时遇到所有服务台被占而需等待的概率为

$$\hat{\Pi} = \sum_{j=n}^{\infty} \hat{p}_j = \frac{K}{1-\theta};$$

而顾客到达瞬时所看到的与离开瞬时所留下的平均队长均为

$$E\hat{q} = \sum_{j=1}^{\infty} j\hat{p}_j = (1-\delta_{n1})U_1 + K\frac{\theta + n(1-\theta)}{(1-\theta)^2};$$

平均等待队长均为

$$E\hat{q}_w = \sum_{j=1}^{\infty} j\hat{p}_{j+n} = \frac{K\theta}{(1-\theta)^2},$$

其中 K, U_1, θ 的含义与定理1相同，而

$$\delta_{ni} = \begin{cases} 1 & (n = i), \\ 0 & (n \neq i). \end{cases}$$

定理2 对于 $GI/M/n$ 系统，若 $\rho < 1$，且 $A(x)$ 为非格子点分布，则队长 $q(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = p_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在，与初始条件无关，且可表示为

$$p_j = \begin{cases} 1 - \rho - \rho\sum_{i=1}^{n-1}\frac{n-i}{i}\hat{p}_{i-1} & (j = 0) \\ \frac{n\rho}{j}\hat{p}_{j-1} & (j = 1,2,\cdots,n-1), \\ \rho\hat{p}_{j-1} & (j = n, n+1, \cdots), \end{cases}$$

其中概率分布 $\{\hat{p}_j\}$ 由定理1给出.

若 $\rho < 1$，但 $A(x)$ 为格子点分布，则队长 $q(t)$ 的分布，当 $t \to \infty$ 时极限不存在.

若 $\rho \geqslant 1$，则

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = 0 \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

推论2 在平衡的 $GI/M/n$ 系统中，任意时刻服务台全占的概率 Π、任意时刻的平均队长 Eq、任意时刻的平均等待队长 Eq_w 分别为

$$\Pi = \sum_{j=n}^{\infty} p_j = \frac{K\rho}{\theta(1-\theta)},$$

$$Eq = \sum_{j=1}^{\infty} jp_j = n\rho + \frac{K\rho}{(1-\theta)^2},$$

$$Eq_w = \sum_{j=1}^{\infty} jp_{j+n} = \frac{K\rho}{(1-\theta)^2},$$

其中 K, θ 均由定理1给出.

定理3 对于 $GI/M/n$ 系统，若 $\rho < 1$，则等待时间 w_m 的极限分布

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = \widehat{W}(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,与初始条件无关,且可表示为

$$\widehat{W}(x) = 1 - \frac{K}{1-\theta}\exp(-n\mu(1-\theta)x) \qquad (x \geqslant 0),$$

其中 K,θ 均由定理 1 给出.

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

推论 3 在平衡的 $GI/M/n$ 系统中,到达顾客需要等待的概率 $\widehat{\Pi}$、顾客的平均等待时间 $\widehat{Ew}$ 分别为

$$\widehat{\Pi} = 1 - \widehat{W}(0) = \frac{K}{1-\theta},$$

$$\widehat{Ew} = \frac{K}{n\mu(1-\theta)^2},$$

其中 K,θ 均由定理 1 给出.

定理 4 对于 $GI/M/n$ 系统,若 $\rho < 1$,且 $A(x)$ 为非格子点分布,则虚等待时间 $w(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = W(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,与初始条件无关,且可表示为

$$W(x) = 1 - \frac{\rho K}{\theta(1-\theta)}\exp(-n\mu(1-\theta)x) \qquad (x \geqslant 0),$$

其中 K,θ 由定理 1 给出.

若 $\rho < 1$,但 $A(x)$ 为格子点分布,则虚等待时间 $w(t)$ 的分布在当 $t\to\infty$ 时极限不存在.

若 $\rho \geqslant 1$,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

推论 4 在平衡的 $GI/M/n$ 系统中,任意时刻服务台全占的概率 Π、平均虚等待时间 Ew 分别为

$$\Pi = 1 - W(0) = \frac{K\rho}{\theta(1-\theta)},$$

$$Ew = \frac{K\rho}{n\mu\theta(1-\theta)^2},$$

其中 K,θ 均由定理 1 给出.

定理 5 系统 $GI/M/n$ 忙期长度 d 的分布 $D(x)$ 的 L-S 变换为

$$D^*(s) = \frac{n\mu[1-f(s)]}{s+n\mu[1-f(s)]} \qquad (\mathrm{Re}(s) > 0),$$

其中 $f(s)$ 为在 $\mathrm{Re}(s) > 0$ 时方程

$$z = A^*(s + n\mu(rz))$$

在单位圆 $|z| < 1$ 内的唯一解,而 $A^*(s)$ 为到达间隔分布 $A(x)$ 的 L-S 变换.

推论 5 若 $\rho \leqslant 1$,则 $D(\infty) = 1$,即 $D(x)$ 为真正的概率分布,忙期平均长度为

$$Ed = \begin{cases} \dfrac{1}{n\mu(1-\theta)} & (\rho < 1), \\ \infty & (\rho = 1), \end{cases}$$

其中 θ 由定理 1 给出.

若 $\rho > 1$,则

$$D(\infty) = 1/\rho < 1,$$

即忙期长度为无穷的概率等于 $1 - 1/\rho > 0$.

5.2 $GI/M/n/n$ 系统

考虑到达间隔分布为 $A(x)$、均值为 $1/\lambda(\lambda > 0)$ 的一般独立输入;服务时间与输入独立,分布是参数为 $\mu(>0)$ 的负指数分布;有 n 个服务台的损失制系统.此系统称为 $GI/M/n/n$ 系统,且有下面的定理及推论.

定理 6 对于 $GI/M/n/n$ 系统,队长 q_m 与 q'_m(注意 q'_m 为第 m 个离开系统的顾客(包括服务完与损失掉的顾客)离开后瞬时的队长)的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等,即

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = \widehat{p}_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots,n)$$

存在,且为

$$\widehat{p}_j = \sum_{r=j}^{n}(-1)^{r-j}\binom{r}{j}U_r \qquad (j = 0,1,2,\cdots,n),$$

其中

$$U_r = \frac{C_r\sum_{i=r}^{n}\binom{n}{i}\frac{1}{C_i}}{\sum_{i=0}^{n}\binom{n}{i}\frac{1}{C_i}} \qquad (r = 0,1,2,\cdots,n);$$

$$C_0 = 1; \quad C_i = \prod_{l=1}^{i}\frac{A^*(l\mu)}{1 - A^*(l\mu)} \qquad (i = 1,2,\cdots,n),$$

$A^*(s)$ 为到达间隔分布 $A(x)$ 的 L-S 变换.

推论 6 在 $GI/M/n/n$ 系统中,顾客到达时遭到损失的概率,即损失率为

$$\widehat{\Pi} = \widehat{p}_n = U_n,$$

其中 U_n 由定理 6 给出.

顾客到达前瞬时与离开后瞬时的平均队长,即平均占用服务台数均为

$$E\widehat{q}=\sum_{j=1}^{n} j\widehat{p}_j = U_1,$$

其中 U_1 由定理 6 给出.

定理 7 对于 $GI/M/n/n$ 系统,若 $A(x)$ 为非格子点分布,则队长 $q(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t)=j\} = p_j \qquad (j=0,1,\cdots,n)$$

存在,与初始条件无关,且为

$$p_j=\begin{cases}1-\dfrac{\lambda}{\mu}\sum\limits_{i=1}^{n}\dfrac{\widehat{p}_{i-1}}{i} & (j=0),\\[2ex] \dfrac{\lambda}{\mu}\dfrac{\widehat{p}_{j-1}}{j} & (j=1,2,\cdots,n).\end{cases}$$

其中概率分布 $\{\widehat{p}_j\}$ 由定理 6 给出.

推论 7 在 $GI/M/n/n$ 系统中,任意时刻 n 个服务台全部被占的概率为

$$\Pi = p_n = \frac{\lambda}{n\mu}(U_{n-1}-nU_n),$$

其中 U_{n-1}, U 均由定理 6 给出 .

任意时刻的平均队长(即平均占用的服务台数)为

$$Eq=\sum_{j=1}^{n} jp_j=\frac{\lambda}{\mu}(1-U_n),$$

其中 U_n 由定理 6 给出.

5.3 M/G/n/n 系统

考虑输入是参数为 $\lambda(\lambda>0)$ 的最简单流,服务时间与输入独立,且分布是均值为 $1/\mu(\mu>0)$ 的一般分布 $B(x)$,有 n 个服务台的损失制系统. 此系统称为 ***M/G/n/n* 系统**,且有如下定理及推论.

定理 8 对于 $M/G/n/n$ 系统,队长 $q(t)$, q_m 与 q'_m(注意 q'_m 为第 m 个离开系统的顾客(包括服务完与损失掉的顾客)离开后瞬时的队长)的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等,即

$$\lim_{t\to\infty}P\{q(t)=j\}=\lim_{m\to\infty}P\{q_m=j\}=\lim_{m\to\infty}P\{q'_m=j\}=p_j \qquad (j=0,1,2,\cdots)$$

存在,且可表示为

$$p_j=\frac{\dfrac{(\lambda/\mu)^j}{j!}}{\sum\limits_{i=0}^{n}\dfrac{(\lambda/\mu)^i}{i!}} \qquad (j=0,1,\cdots,n). \tag{5-1}$$

称式(5-1)为埃尔朗公式.

推论 8 在 $M/G/n/n$ 系统中,顾客到达时遇到服务台全部被占而遭到损失的

概率 $\widehat{\Pi}$ 与任意时刻服务台全部被占的概率 Π 相等，且均为

$$\widehat{\Pi} = \Pi = p_n = \frac{\dfrac{(\lambda/\mu)^n}{n!}}{\sum\limits_{i=0}^{n} \dfrac{(\lambda/\mu)^i}{i!}};$$

任意时刻，顾客到达前瞬时与离开后瞬时的平均队长，即平均占用的服务台数均为

$$Eq = \sum_{j=1}^{n} jp_j = \frac{\lambda}{\mu}(1 - \widehat{\Pi}).$$

定理 9　对于 $M/G/n/n$ 系统，在队长 $q(t) = j(j = 0,1,2,\cdots,n)$ 的条件下，正在服务的这 j 个顾客在时刻 t 以后的剩余时间 $r_1(t), r_2(t), \cdots, r_j(t)$ 的极限联合分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{r_1(t) \leqslant x_1, \cdots, r_j(t) \leqslant x_j \mid q(t) = j\} = \widetilde{B}(x_1)\cdots\widetilde{B}(x_j)$$

存在，与初始条件无关，而

$$\widetilde{B}(x_i) = \mu\int_0^{x_i}(1 - B(u))\mathrm{d}u \qquad (x_i \geqslant 0, i = 1,2,\cdots,j).$$

推论 9　在系统 $M/G/n/n$ 中，顾客的平均剩余服务时间为

$$\int_0^{\infty} x\mathrm{d}\widetilde{B}(x) = \frac{\mu\sigma_v^2}{2} + \frac{1}{2\mu},$$

其中 σ_v^2 为服务时间的方差.

6　$GI/M/\infty$ 与 $M/G/\infty$ 系统

6.1　$GI/M/\infty$ 系统

考虑到达间隔分布为 $A(x)$，均值为 $1/\lambda(\lambda > 0)$ 的一般独立输入，服务时间与输入独立，且分布是参数为 $\mu(\mu > 0)$ 的负指数分布，有无穷多个服务台的系统. 此系统称为 $GI/M/\infty$ 系统. 在此系统中，顾客到达时不需等待就能被接受服务. 对于此系统，有如下定理和推论.

定理 1　对于 $GI/M/\infty$ 系统，队长 q_m 与 q'_m 的极限分布均存在，与初始条件无关，且相等，即

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = \widehat{p}_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在，且可表示为

$$\widehat{p}_j = \sum_{r=j}^{\infty}(-1)^{r-j}\binom{r}{j}C_r \qquad (j = 0,1,2,\cdots),$$

其中

$$C_0 = 1;\quad C_r = \prod_{i=1}^{r} \frac{A^*(i\mu)}{1 - A^*(i\mu)} \qquad (r = 1,2,\cdots),$$

$A^*(s)$ 为到达间隔分布 $A(x)$ 的 L-S 变换.

推论 1　在 $GI/M/\infty$ 系统中,顾客到达前瞬时与离开后瞬时的平均队长,即平均占用的服务台数为

$$E\widehat{q} = \sum_{j=1}^{\infty} j\widehat{p}_j = C_1 = \frac{A^*(\mu)}{1 - A^*(\mu)},$$

其中 $C_1, A^*(s)$ 的含义如定理 1.

定理 2　对于 $GI/M/\infty$ 系统,若 $A(x)$ 为非格子点分布,则队长 $q(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = p_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在,与初始条件无关,且可表示为

$$p_j = \begin{cases} 1 - \dfrac{\lambda}{\mu}\displaystyle\sum_{i=1}^{\infty} \dfrac{\widehat{p}_{i-1}}{i} & (j = 0), \\ \dfrac{\lambda}{\mu}\dfrac{\widehat{p}_{j-1}}{j} & (j = 1,2,\cdots), \end{cases}$$

其中 $\widehat{p}_j$ 由定理 1 给出.

推论 2　在系统 $GI/M/\infty$ 中,任意时刻的平均队长为

$$Eq = \sum_{j=1}^{\infty} jp_j = \frac{\lambda}{\mu}.$$

6.2　$M/G/\infty$ 系统

考虑输入是参数为 $\lambda(\lambda > 0)$ 的最简单流,服务时间与输入独立,且分布是均值为 $1/\mu(\mu > 0)$ 的一般分布 $B(x)$,有无穷多个服务台的系统.此系统称为 **$M/G/\infty$ 系统**.在此系统中,顾客到达时不需等待就能接受服务.对于此系统,有如下定理和推论.

定理 3　对于 $M/G/\infty$ 系统,队长 $q(t)$, q_m 与 q'_m 的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等,即

$$\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = p_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在,且可表示为

$$p_j = \exp\left(-\frac{\lambda}{\mu}\right)\frac{\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^j}{j!} \qquad (j = 0,1,2,\cdots).$$

推论 3　在 $M/G/\infty$ 系统中,任意时刻,顾客到达前瞬时与离开后瞬时的平均队长,即平均占用的服务台数均为

$$Eq = \sum_{j=1}^{\infty} jp_j = \frac{\lambda}{\mu}.$$

定理 4 对于 $M/G/\infty$ 系统,在队长 $q(t) = j$ 的条件下,正在接受服务的这 j 个顾客在时刻 t 以后的剩余服务时间 $r_1(t), r_2(t), \cdots, r_j(t)$ 的极限联合分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{r_1(t) \leqslant x_1, \cdots, r_j(t) \leqslant x_j \mid q(t) = j\} = \tilde{B}(x_1)\cdots\tilde{B}(x_j)$$

存在,与初始条件无关,而

$$\tilde{B}(x_i) = \mu\int_0^{x_i}(1 - B(u))\mathrm{d}u \qquad (x_i \geqslant 0, i = 1,2,\cdots,j).$$

推论 4 在 $M/G/\infty$ 系统中,顾客的平均剩余服务时间为

$$\int_0^{\infty} x\mathrm{d}\tilde{B}(x) = \frac{\mu\sigma_v^2}{2} + \frac{1}{2\mu},$$

其中 σ_v^2 为服务时间的方差.

7 $GI/G/1$ 系统

考虑到达间隔分布为 $A(x)$,均值为 $1/\lambda(\lambda > 0)$ 的一般独立输入,服务时间与输入独立,且分布是均值为 $1/\mu(\mu > 0)$ 的一般分布 $B(x)$,有单服务台的等待制系统.此系统称为 **$GI/G/1$ 系统**.在此系统中,服务次序在讨论队长与忙期时不需作任何规定,但在讨论等待时间分布时假定为先到先服务,令 $\rho = \frac{\lambda}{\mu}$,则对于该系统,有下面的定理和推论.

定理 1 对于 $GI/G/1$ 系统,若 $\rho < 1$,则等待时间 w_m 的极限分布

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = \hat{W}(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,与初始条件无关,且满足积分方程

$$\hat{W}(x) = \int_{-\infty}^{x} \hat{W}(x - u)\mathrm{d}H(u) \qquad (x \geqslant 0),$$

其中 $H(u) = \int_{0-}^{\infty} B(u + t)\mathrm{d}A(t) \qquad (-\infty < u < +\infty).$

进一步,$\hat{W}(x)$ 的 L-S 变换可表示为

$$\hat{W}^*(s) = \exp\left(-\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{j}\int_0^{\infty}(1 - \exp(-sx))\mathrm{d}H^{(j)}(x)\right) \qquad (\mathrm{Re}(s) > 0),$$

其中

$$H^{(j)}(x) = \int_{0-}^{\infty} B^{(j)}(x + t)\mathrm{d}A^{(j)}(t) \qquad (-\infty < x < \infty)$$

为 $H(x)$ 的 j 重卷积,$A^{(j)}(x)$, $B^{(j)}(x)$ 分别为 $A(x)$, $B(x)$ 的 j 重卷积.

若 $\rho > 1$,或 $\rho = 1$ 且 $A(x)$ 与 $B(x)$ 不全为定长分布,则

$$\lim_{m\to\infty} P\{w_m \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

若 $\rho = 1$,且 $A(x)$ 与 $B(x)$ 全为定长分布,则

$$\lim_{m\to\infty} p\{W_m \leqslant x\} = W_1(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,但与初始条件有关.

推论 1　在平衡的 $GI/G/1$ 系统中,到达顾客需要等待的概率为

$$\begin{aligned}\hat{\Pi} &= 1 - W(0) = 1 - \hat{W}^*(\infty)\\ &= 1 - \exp\left(-\sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j}\int_{0-}^{\infty} (1 - B^{(j)}(x))\mathrm{d}A^{(j)}(x)\right),\end{aligned}$$

其中 $A^{(j)}(x)$, $B^{(j)}(x)$ 的含义如定理 1. 若上式右端级数收敛,则顾客的平均等待时间为

$$E\hat{W} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j}\int_0^{\infty} x\mathrm{d}H^{(j)}(x),$$

其中 $H^{(j)}(x)$ 的含义如定理 1.

定理 2　对于 $GI/G/1$ 系统,若 $\rho < 1$,且 $A(x)$ 为非格子点分布,则虚等待时间 $w(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = W(x) \qquad (x \geqslant 0)$$

存在,与初始条件无关,且为

$$W(x) = 1 - \rho + \lambda\int_0^x \hat{W}(x - u)(1 - B(u))\mathrm{d}u \qquad (x \geqslant 0),$$

其中 $\hat{W}(x)$ 由定理 1 给出.

若 $\rho < 1$,且 $A(x)$ 为格子点分布,则虚等待时间 $w(t)$ 的分布当 $t\to\infty$ 时极限不存在.

若 $\rho > 1$,或 $\rho = 1$,但 $A(x)$ 与 $B(x)$ 不全为定长分布,则

$$\lim_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\} = 0,$$

此时不为概率分布.

若 $\rho = 1$,且 $A(x)$ 与 $B(x)$ 全为定长分布,则极限 $\lim\limits_{t\to\infty} P\{w(t) \leqslant x\}$ 不存在.

推论 2　在平衡的 $GI/G/1$ 系统中,任意时刻服务台被占的概率为

$$\Pi = 1 - W(0) = \rho;$$

平均虚等待时间为

$$Ew = \rho\left(\frac{\mu^2\sigma_v^2 + 1}{2\mu} + E\hat{w}\right).$$

其中 $E\hat{w}$ 为平均等待时间,由推论 1 给出;σ_v^2 为服务时间的方差.

定理 3　对于 $GI/G/1$ 系统,若 $\rho < 1$,则队长 q_m 与 q'_m 的极限分布均存在,与初始条件无关,且相等,即

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = \hat{p}_j \qquad (j = 0,1,2,\cdots)$$

存在,且为

$$\widehat{p}_j = \begin{cases} \exp\left(-\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{j}\int_{0-}^{\infty}(1-B^{(j)}(x))\mathrm{d}A^{(j)}(x)\right) & (j=0), \\ \int_{0-}^{\infty}(A^{(j)}(x)-A^{(j+1)}(x))\mathrm{d}(\widehat{W}(x)*B(x)) & (j=1,2,\cdots), \end{cases}$$

其中 $\widehat{W}(x)$ 由定理1给出；$A^{(j)}(x)$ 与 $B^{(j)}(x)$ 分别为 $A(x)$ 与 $B(x)$ 的 j 重卷积；$*$ 为卷积运算符号.

若 $\rho>1$，或 $\rho=1$ 但 $A(x)$ 与 $B(x)$ 不全为定长分布，则

$$\lim_{m\to\infty}P\{q_m=j\}=\lim_{m\to\infty}P\{q'_m=j\}=0 \qquad (j=0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

若 $\rho=1$，且 $A(x)$ 与 $B(x)$ 全为定长分布，则

$$\lim_{m\to\infty}P\{q_m=j\}=\lim_{m\to\infty}P\{q'_m=j\} \qquad (j=0,1,2,\cdots)$$

存在，但与初始条件有关.

推论3　在平衡的 $GI/G/1$ 系统中，顾客到达时遇到服务台被占而需等待的概率为

$$\widehat{H}=1-\widehat{p}_0=1-\exp\left(-\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{j}\int_{0-}^{\infty}(1-B^{(j)}(x))\mathrm{d}A^{(j)}(x)\right);$$

顾客到达前瞬时与离开后瞬时的平均队长均为

$$E\widehat{q}=\sum_{j=1}^{\infty}j\widehat{p}_j=1+\int_{0}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty}A^{(j)}(x)\mathrm{d}\widehat{W}(x),$$

其中 $\widehat{W}(x)$ 由定理1给出；$A^{(j)}(x)$ 与 $B^{(j)}(x)$ 分别为 $A(x)$ 与 $B(x)$ 的 j 重卷积.

定理4　对于 $GI/G/1$ 系统，若 $\rho<1$，且 $A(x)$ 为非格子点分布，则队长 $q(t)$ 的极限分布

$$\lim_{t\to\infty}P\{q(t)=j\}=p_j \qquad (j=0,1,2,\cdots)$$

存在，与初始条件无关，且为

$$p_j=\begin{cases} 1-\rho & (j=0), \\ \rho\int_{0-}^{\infty}(A^{(j-1)}(x)-A^{(j)}(x))\mathrm{d}_x\left(\widehat{W}(x)*u\int_0^x(1-B(u))\mathrm{d}u\right) & (j=1,2,\cdots), \end{cases}$$

其中 $\widehat{W}(x)$ 由定理1给出；$A^{(j)}(x)$ 为 $A(x)$ 的 j 重卷积.

若 $\rho<1$，且 $A(x)$ 为格子点分布，则队长 $q(t)$ 的分布当 $t\to\infty$ 时极限不存在.

若 $\rho>1$，或 $\rho=1$ 但 $A(x)$ 与 $B(x)$ 不全为定长分布，则

$$\lim_{t\to\infty}P\{q(t)=j\}=0 \qquad (j=0,1,2,\cdots),$$

此时不为概率分布.

若 $\rho=1$，且 $A(x)$ 与 $B(x)$ 全为定长分布，则极限 $\lim_{t\to\infty}P\{q(t)=j\}$ 不存在.

推论4　在平衡的 $GI/G/1$ 系统中，任意时刻服务台被占的概率为

$$H=1-p_0=\rho,$$

任意时刻的平均队长为

$$Eq = \sum_{j=1}^{\infty} jp_j = \rho + \lambda E\widehat{w},$$

其中 $E\widehat{w}$ 由推论 1 所给.

定理 5　对于 $GI/G/1$ 系统,忙期长度 d 的分布 $D(x)$ 的 L-S 变换为

$$D^*(s) = 1 - \exp\Big(-\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{j}\int_{0-}^{\infty}\exp(-sx)(1 - A^{(j)}(x))\mathrm{d}B^{(j)}(x)\Big) \quad (\mathrm{Re}(s) > 0),$$

其中 $A^{(j)}(x), B^{(j)}(x)$ 分别为 $A(x)$ 与 $B(x)$ 的 j 重卷积.

推论 5　若 $\rho < 1$,或 $\rho = 1$ 但 $A(x)$ 与 $B(x)$ 不全为定长分布,则 $D(\infty) = 1$,即 $D(x)$ 为真正的概率分布,而忙期的平均长度为

$$Ed = \begin{cases}\dfrac{1}{\mu}\exp\Big(\displaystyle\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{j}\int_{0-}^{\infty}A^{(j)}(x)\mathrm{d}B^{(j)}(x)\Big) & (\rho < 1),\\ \infty & (\rho = 1,\text{但 } A(x), B(x) \text{ 不全为定长分布}).\end{cases}$$

若 $\rho = 1$,且 $A(x)$ 与 $B(x)$ 全为定长分布,则 $D(x) = 0$.

若 $\rho > 1$,则

$$D(\infty) = 1 - \exp\Big(-\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{j}\int_{0-}^{\infty}(1 - A^{(j)}(x))\mathrm{d}B^{(j)}(x)\Big) < 1,$$

因而忙期长度为无穷的概率等于 $1 - D(\infty) > 0$.

8　矩阵解析方法

矩阵解析方法可以比较方便地求得复杂排队系统的数量指标,更重要的是它能利用计算机来实现对数量指标的计算.下面用 $\boldsymbol{e}$ 表示分量均为 1 的列向量,$\boldsymbol{I}$ 表示单位矩阵,它们的维数和阶数均分别使它们所在的公式有意义.

8.1　PH 分布及其性质

设在有限状态空间 $E = \{1,2,\cdots,m,m+1\}$ 上以 $m+1$ 为吸收态的马尔可夫(A.A.Markov)过程(简称**马氏过程**)为 $\{X(t):t \geqslant 0\}$,其生成子为

$$\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{T} & \boldsymbol{T}^0\\ \boldsymbol{0} & 0\end{bmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{T}$ 为 $m \times m$ 阶非奇异矩阵,其所有对角元素为负,非对角元素为非负;m 维非零列向量 $\boldsymbol{T}^0$ 满足 $\boldsymbol{Te} + \boldsymbol{T}^0 = \boldsymbol{0}$.并设 $m+1$ 维行向量$(\boldsymbol{\alpha}, \alpha_{m+1})$为马氏过程 $\{X(t):t \geqslant 0\}$ 的初始概率向量,且有 $\boldsymbol{\alpha e} + \alpha_{m+1} = 1$.那么,马氏过程 $\{X(t):t \geqslant 0\}$ 由初始状态出发最终进入吸收态所需时间的概率分布为

$$F(x) = 1 - \boldsymbol{\alpha}\exp(\boldsymbol{T}x)\boldsymbol{e} \qquad (x \geqslant 0). \tag{8-1}$$

定义 1　由式(8-1)定义的概率分布称为**PH 分布**,$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{T})$ 称为 $F(x)$ 的一个表

示.

由定义1,有下列结论:

1° $F(x)$ 在 $x=0$ 处有一高度为 α_{m+1} 的跳跃,其密度函数为

$$F'(x)=\boldsymbol{\alpha}\exp(\boldsymbol{T}x)\boldsymbol{T}^0 \qquad (x>0);$$

2° $F(x)$ 的L-S变换为

$$f(s)=\alpha_{m+1}+\boldsymbol{\alpha}(s\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T})^{-1}\boldsymbol{T}^0 \qquad (\mathrm{Re}(s)\geqslant 0);$$

3° $F(x)$ 的非中心矩有限,且为

$$\mu'_i=(-1)^i i!(\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{T}^{-i}\boldsymbol{e}) \qquad (i\geqslant 0).$$

例1 参数为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m$ 的 m 阶埃尔朗分布为具有表示 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{T})$ 的PH分布,其中

$$\boldsymbol{\alpha}=(1,0,\cdots,0);$$

$$\boldsymbol{T}=\begin{bmatrix}-\lambda_1 & \lambda_1 & & & \\ & -\lambda_2 & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\lambda_{m-1} & \lambda_{m-1} \\ & & & & -\lambda_m\end{bmatrix}.$$

例2 超指数分布

$$F(x)=\sum_{k=1}^{m}\alpha_k(1-\exp(-\lambda_k x))$$

为具有表示 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{T})$ 的PH分布,其中

$$\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m);$$

$$\boldsymbol{T}=\mathrm{diag}(-\lambda_1,-\lambda_2,\cdots,-\lambda_m).$$

定理1 当且仅当 $F(x)$ 满足下列条件时,$[0,\infty)$ 上的概率分布 $F(x)$ 为PH分布:

1° $F(x)$ 具有有理L-S变换;

2° 在 $(0,\infty)$ 上,$F(x)$ 具有正的连续密度函数;

3° $F(x)$ 的L-S变换具有唯一的最大实部极点.

设在有限状态空间 $\{1,2,\cdots,m,m+1\}$ 上以 $m+1$ 为吸收态的马尔可夫链(简称马氏链)为 $\{X_n;n\geqslant 0\}$,其概率转移矩阵为

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{T} & \boldsymbol{T}^0\\ \boldsymbol{0} & 1\end{bmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{T}$ 为 $m\times m$ 阶次随机矩阵,$(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T})$ 非奇异,且 $\boldsymbol{T}\boldsymbol{e}+\boldsymbol{T}^0=\boldsymbol{e}$.

给定马氏链 $\{X_n:n\geqslant 0\}$ 的初始概率向量为 $(\boldsymbol{\alpha},\alpha_{m+1})$,$\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{e}+\alpha_{m+1}=1$,则马氏链 $\{X_n:n\geqslant 0\}$ 由初始状态出发,第 k 步进入吸收状态的概率 p_k,$k\geqslant 0$ 如下:

$$\begin{cases}p_0=\alpha_{m+1},\\ p_k=\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{T}^{k-1}\boldsymbol{T}^0 \quad (k\geqslant 1).\end{cases} \tag{8-2}$$

定义2 由式(8-2)定义的离散概率分布 $\{p_k:k\geqslant 0\}$ 称为**离散PH分布**,$(\boldsymbol{\alpha},$

$\boldsymbol{T}$) 称为它的表示.

由式(8-2),容易得到离散 PH 分布 $\{p_k: k \geq 0\}$ 的母函数和阶乘矩如下:

离散 PH 分布 $\{p_k: k \geq 0\}$ 的母函数为

$$P(z) = \alpha_{m+1} + z\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{I} - z\boldsymbol{T})^{-1}\boldsymbol{T}^0;$$

离散 PH 分布 $\{p_k: k \geq 0\}$ 的阶乘矩为

$$P^{(k)}(1) = k!\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{T}^{k-1}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{T})^{-k}\boldsymbol{e} \qquad (k \geq 0).$$

定义 3 对于具有表示($\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{T}$)的 PH 分布 $F(x)$,若 $\boldsymbol{Q}^* = \boldsymbol{T} + (1-\alpha_{m+1})^{-1}\boldsymbol{T}^0\boldsymbol{\alpha}$ 为不可约的,则称表示($\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{T}$) 为不可约的.除特别声明,下面总假设所给的表示为不可约的,PH 分布均指连续时间的 PH 分布.

PH 分布的封闭性:

1° 具有 m 阶表示($\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{T}$) 的 PH 分布 F 和具有 n 阶表示($\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{S}$) 的 PH 分布 G,它们的卷积 $F * G$ 仍为 PH 分布,且具有 mn 阶表示($\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{L}$),其中 $\boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{\alpha}, \alpha_{m+1}\boldsymbol{\beta})$,

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{T} & \boldsymbol{T}^0\boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{S} \end{bmatrix};$$

2° 设 F_i 为具有 m_i 阶表示($\boldsymbol{\alpha}(i), \boldsymbol{T}(i)$) 的 PH 分布,则 $\sum_{i=1}^{k} p_i F_i$ 亦为 PH 分布,且具有 $\sum_{i=1}^{k} m_i$ 阶表示($\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{T}$),其中 $\sum_{i=1}^{k} p_i = 1$,

$$\boldsymbol{\alpha} = (p_1\boldsymbol{\alpha}(1), p_2\boldsymbol{\alpha}(2), \cdots, p_k\boldsymbol{\alpha}(k)),$$
$$\boldsymbol{T} = \mathrm{diag}(\boldsymbol{T}(1), \boldsymbol{T}(2), \cdots, \boldsymbol{T}(k));$$

3° 设 $\{s_v: v \geq 0\}$ 为具有 n 阶表示($\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{S}$) 的离散 PH 分布,$F$ 为具有 m 阶表示($\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{T}$) 的 PH 分布,则 $\sum_{v=0}^{\infty} s_v F^{(v)}$ 为具有 mn 阶表示($\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{L}$) 的 PH 分布,其中 $F^{(v)}$ 为 F 的 v 重卷积,

$$\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\alpha} \otimes \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{I} - \alpha_{m+1}\boldsymbol{S})^{-1},$$
$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{T} \otimes \boldsymbol{I} + (1 - \alpha_{m+1})\boldsymbol{T}^0\boldsymbol{\alpha} \otimes (\boldsymbol{I} - \alpha_{m+1}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S},$$
$$\gamma_{mn+1} = \beta_{n+1} + \alpha_{m+1}\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{I} - \alpha_{m+1}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^0,$$
$$\boldsymbol{L}^0 = \boldsymbol{T}^0 \otimes (\boldsymbol{I} - \alpha_{m+1}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^0,$$

其中 $\otimes$ 为克罗内克(Z. Kronecker) 积运算;

4° 设 $\{s_v: v \geq 0\}$, $\{p_k: k \geq 0\}$ 分别为具有 n 阶表示($\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{S}$) 和 m 阶表示($\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{T}$) 的离散 PH 分布,则 $\sum_{v=0}^{\infty} s_v\{p_k\}^{(v)}$ 为具有 mn 阶表示($\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{L}$) 的离散 PH 分布,其中 $\{p_k\}^{(v)}$ 为 $\{p_k: k \geq 0\}$ 的 v 重卷积,

$$\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\alpha} \otimes \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{I} - \alpha_{m+1}\boldsymbol{S})^{-1},$$
$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{T} \otimes \boldsymbol{I} + (1 - \alpha_{m+1})\boldsymbol{T}^0\boldsymbol{\alpha} \otimes (\boldsymbol{I} - \alpha_{m+1}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S};$$

5° 设 X, Y 为相互独立的随机变量,它们的分布分别为具有 m 阶表示($\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{T}$) 和 n 阶表示($\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{S}$) 的 PH 分布,则 $\max(X, Y)$ 的分布为具有 $mn + m + n$ 阶表示($\boldsymbol{\gamma}$,

L) 的 PH 分布, min(X, Y) 的分布为具有 mn 阶表示($\boldsymbol{\alpha}\otimes\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{I}+\boldsymbol{I}\otimes\boldsymbol{S}$) 的 PH 分布,其中

$$\boldsymbol{\gamma}=(\boldsymbol{\alpha}\otimes\boldsymbol{\beta}, \beta_{n+1}\boldsymbol{\alpha}, \alpha_{m+1}\boldsymbol{\beta}),$$

$$\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{I}+\boldsymbol{I}\otimes\boldsymbol{S} & \boldsymbol{I}\otimes\boldsymbol{S}^0 & \boldsymbol{T}^0\otimes\boldsymbol{I} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{T} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{S} \end{bmatrix}.$$

8.2　$GI/M/1$ 型马氏链(过程)与 $GI/PH/1$ 系统

定义 4　若状态空间 $E=\{(i,j): i\geqslant 0, 1\leqslant j\leqslant m\}$ 上的马氏链 $\{X_n: n\geqslant 0\}$ 的概率转移矩阵具有如下形式:

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{B}_0 & \boldsymbol{A}_0 & & & \\ \boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_0 & & \\ \boldsymbol{B}_2 & \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{A}_k, \boldsymbol{B}_k$($k\geqslant 0$) 均为 $m\times m$ 阶非负矩阵,则称马氏链 $\{X_n: n\geqslant 0\}$ 为 $GI/M/1$ 型马氏链.有时,也称 $\boldsymbol{P}$ 为 **$GI/M/1$ 型马氏链**.状态集 $\underline{i}=\{(i,j): 1\leqslant j\leqslant m\}$ 称为水平 i.

记 $m\times m$ 阶矩阵 $\boldsymbol{R}$ 为方程 $\boldsymbol{X}=\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{X}^k\boldsymbol{A}_k$ 的最小非负解,称 $\boldsymbol{R}$ 为**马氏链 $\boldsymbol{P}$ 的率矩阵**.令

$$\boldsymbol{B}[\boldsymbol{R}]=\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{R}^k\boldsymbol{B}_k,$$

$$\boldsymbol{A}=\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{A}_k,$$

$$\boldsymbol{A}^*(z)=\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{A}_k z^k \qquad (0\leqslant z\leqslant 1),$$

$$\boldsymbol{\beta}^*=\sum_{k=1}^{\infty}k\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{e}.$$

若 $\boldsymbol{A}$ 为不可约的,则存在正的 m 维行向量 $\boldsymbol{\pi}$,使得 $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{\pi}$ 及 $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{e}=1$.

定理 2　对于不可约马氏链 $\boldsymbol{P}$,若率矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的所有特征值均在单位圆内,且随机矩阵 $\boldsymbol{B}[\boldsymbol{R}]$ 有正的左不变量,则马氏链 $\boldsymbol{P}$ 为正常返的.

定理 3　若马氏链 $\boldsymbol{P}$ 为正常返的,其不变概率向量为 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots)$, $\boldsymbol{x}_i$($i\geqslant 0$) 均为 m 维行向量,则有

1°　$\boldsymbol{x}_i=\boldsymbol{x}_0\boldsymbol{R}^i \qquad (i\geqslant 0),$　　　　(8-3)

称式(8-3) 为马氏链 $\boldsymbol{P}$ 的**矩阵几何解**;

2° 率矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的谱半径 $\mathrm{sp}(\boldsymbol{R}) < 1$;

3° 矩阵 $\boldsymbol{B}[\boldsymbol{R}]$ 为随机矩阵;

4° m 维行向量 $\boldsymbol{x}_0$ 为 $\boldsymbol{B}[\boldsymbol{R}]$ 正的左不变向量,并由 $\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{e}=1$ 规范化.

定理 4 若 $\boldsymbol{A}$ 不可约,则不可约马氏链 $\boldsymbol{P}$ 正常返的充分必要条件为 $\boldsymbol{\pi\beta}^* > 1$ 及 $\boldsymbol{B}[\boldsymbol{R}]$ 具有正的左不变概率向量.

下面考虑 $GI/PH/1$ 系统,说明其状态过程为 $GI/M/1$ 型马氏更新过程,并由此出发来讨论其排队指标.

在 $GI/PH/1$ 系统中,设顾客到达时间间隔分布为 F, $F(0+)=0$,其均值 λ'_1 有限;服务时间独立同分布,为具有 v 阶不可约表示$(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{S})$ 的 PH 分布,并设 $\beta_{v+1}=0$,其均值为

$$\mu'_1=-\boldsymbol{\beta S}^{-1}\boldsymbol{e}.$$

记 I_n 为第 n 次到达前瞬时系统的队长;J_n 为第 n 次到达后瞬时系统服务台所处的位相;τ_n 为第 $n-1$ 次与第 n 次到达的时间间隔,则 $\{(I_n,J_n,\tau_n):n\geqslant 0\}$ 为状态空间 $\{(i,j,x):i\geqslant 0,1\leqslant j\leqslant v,x\geqslant 0\}$ 上的马氏更新过程,其概率转移函数矩阵

$$\boldsymbol{P}(x)=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_0(x) & \boldsymbol{A}_0(x) & & & \\ \boldsymbol{B}_1(x) & \boldsymbol{A}_1(x) & \boldsymbol{A}_0(x) & & \\ \boldsymbol{B}_2(x) & \boldsymbol{A}_2(x) & \boldsymbol{A}_1(x) & \boldsymbol{A}_0(x) & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots\end{bmatrix}, \tag{8-4}$$

其中对于 $k\geqslant 0, x\geqslant 0$,

$$\boldsymbol{A}_k(x)=\int_0^x \boldsymbol{P}(k,t)\mathrm{d}F(t),$$

$$\boldsymbol{B}_k(x)=\sum_{i=k+1}^{\infty}\int_0^x \boldsymbol{P}(i,t)\mathrm{d}F(t)\boldsymbol{e\beta},$$

对于任意 $t\geqslant 0$, $\{\boldsymbol{P}(k,t)\}$ 由其母函数

$$\boldsymbol{P}^*(z,t)=\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{P}(k,t)z^k=\exp\{(\boldsymbol{S}+z\boldsymbol{S}^0\boldsymbol{\beta})t\}(|z|\leqslant 1)$$

唯一确定.

定义 5 称具有概率转移函数矩阵式(8-4)的马氏更新过程 $\boldsymbol{P}(x)$ 为 $\boldsymbol{GI/M/1}$ **型马氏更新过程**.显然,其嵌入马氏链 $\boldsymbol{P}(\infty)$ 为 $GI/M/1$ 型马氏链.

记 $$\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{A}_k(\infty),\boldsymbol{B}_k=\boldsymbol{B}_k(\infty)\qquad(k\geqslant 0),$$

并令 $v\times v$ 阶矩阵 $\boldsymbol{R}$ 为方程 $\boldsymbol{X}=\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{X}^k\boldsymbol{A}_k$ 的最小非负解.由定理 4 即可证明,嵌入马氏链 $\boldsymbol{P}(\infty)$ 正常返的充分必要条件为 $\mu'_1<\lambda'_1$.再由定理 3,可得

定理 5 若 $\mu'_1<\lambda'_1$,则平衡 $GI/PH/1$ 系统在顾客到达时刻所看到的队长分布为

$$\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{x}_0,\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots),$$

$$\boldsymbol{x}_k=C\boldsymbol{\beta R}^k\qquad(k\geqslant 0),$$

在顾客到达时刻所看到的平均队长为

$$L_1=C\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{R})^{-2}\boldsymbol{e}-1,$$

其中
$$C = [\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{e}]^{-1}.$$

定理6　若 $\mu'_1 < \lambda'_1$，则系统 $GI/PH/1$ 在任意时刻 t 的队长的极限分布为

$$\boldsymbol{Y} = (Y_0, Y_1, Y_2, \cdots),$$
$$Y_0 = 1 - \lambda'^{-1}_1\mu'_1,$$
$$Y_k = C\lambda'^{-1}_1(\boldsymbol{\beta R}^k - \boldsymbol{\beta R}^{k-1} - (\boldsymbol{\beta R}^k\boldsymbol{e})\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{S}^{-1} \qquad (k \geqslant 1).$$

平衡系统在任意时刻的平均队长为
$$L_2 = \lambda'^{-1}_1\mu'_1 L_1 - C\lambda'^{-1}_1\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{e},$$
其中 L_1, C 均由定理5给出.

定理7　对于平衡的 $GI/PH/1$ 系统，在先到先服务规则下，顾客等待时间分布的 L-S 变换为
$$\widehat{W}^*(s) = C\boldsymbol{\beta}\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{R}^k((s\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^0\boldsymbol{\beta})^k\boldsymbol{e} \qquad (\mathrm{Re}(s) \geqslant 0);$$
顾客在系统中逗留时间分布的 L-S 变换为
$$U^*(s) = C\boldsymbol{\beta}\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{R}^k((s\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^0\boldsymbol{\beta})^{k+1}\boldsymbol{e} \qquad (\mathrm{Re}(s) \geqslant 0);$$
顾客在任意时刻的虚等待时间分布的 L-S 变换为
$$W^*(s) = 1 - \rho + \lambda'^{-1}_1 C\boldsymbol{\beta}\sum_{k=1}^{\infty}\boldsymbol{R}^{k-1}(\boldsymbol{R} - \boldsymbol{Re\beta} - \boldsymbol{I})\boldsymbol{S}^{-1}\cdot ((s\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^0\boldsymbol{\beta})^k\boldsymbol{e} \qquad (\mathrm{Re}(s) \geqslant 0),$$
其中 $\rho = \lambda'^{-1}_1\mu'_1$；$C$ 由定理5给出.

推论1　平衡 $GI/PH/1$ 系统的平均等待时间为
$$E\widehat{w} = \lambda'_1 L_2 - \mu'_1,$$
其中 L_2 由定理6给出，平均逗留时间为
$$Eu = \lambda'_1 L_2,$$
平均虚等待时间为
$$Ew = \rho E\widehat{w} + \frac{1}{2}\lambda'^{-1}_1\mu'_2,$$
其中
$$\rho = \lambda'^{-1}_1\mu'_1;\quad \mu'_2 = 2\boldsymbol{\beta S}^{-2}\boldsymbol{e}.$$

定义6　若状态空间 $E = \{(i,j): i \geqslant 0, 1 \leqslant j \leqslant m\}$ 上的马氏过程 $\{X(t): t \geqslant 0\}$ 的无穷小生成子具有如下形式：
$$\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{B}_0 & \boldsymbol{A}_0 & & & \\ \boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_0 & & \\ \boldsymbol{B}_2 & \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}, \tag{8-5}$$
矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的所有对角元素均严格为负，非对角元素均为非负，且 $m \times m$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}_k, \boldsymbol{B}_k$ 满足

$$\sum_{i=0}^{k}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{e} + \boldsymbol{B}_k\boldsymbol{e} = 0 \qquad (k \geqslant 0),$$

则称马氏过程 $\{X(t):t \geqslant 0\}$ 为 **GI/M/1 型马氏过程**.

定理 8 不可约马氏过程 $\boldsymbol{Q}$ 为正常返的充分必要条件为方程 $\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{X}^k\boldsymbol{A}_k = 0$ 的最小非负解 $\boldsymbol{R}$ 的谱半径 $\mathrm{sp}(\boldsymbol{R}) < 1$ 及存在正向量 $\boldsymbol{x}_0$,使得

$$\boldsymbol{x}_0\boldsymbol{B}[\boldsymbol{R}] = 0,$$

其中 $\boldsymbol{B}[\boldsymbol{R}] = \sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{R}^k\boldsymbol{B}_k$ 为一生成子.

定理 9 若马氏过程 $\boldsymbol{Q}$ 不可约正常返,则其平稳概率向量 $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots)$ 可表示为

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0\boldsymbol{R}^k \qquad (k \geqslant 1),$$

且 $\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{e} = 1$.此时,称马氏过程 $\boldsymbol{Q}$ 具有矩阵几何解.

定理 10 率矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的谱半径 $\mathrm{sp}(\boldsymbol{R}) < 1$ 的充分必要条件为

$$\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{e} < \sum_{k=2}^{\infty}(k-1)\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{e},$$

其中 $\boldsymbol{\pi}$ 为 A 的平稳概率向量,即

$$\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{A} = 0, \quad \boldsymbol{\pi}\boldsymbol{e} = 1.$$

定义 7 若式(8-5)的 $\boldsymbol{Q}$ 矩阵可简化为如下特殊形式

$$\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{B}_0 & \boldsymbol{A}_0 & & & \\ \boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_0 & & \\ & \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_0 & \\ & & \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{B}_0\boldsymbol{e} + \boldsymbol{A}_0\boldsymbol{e} = \boldsymbol{B}_1\boldsymbol{e} + \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{e} + \boldsymbol{A}_0\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{A}_2 + \boldsymbol{A}_1 + \boldsymbol{A}_0)\boldsymbol{e} = 0$,则称此时的马氏过程 $\{X(t):t \geqslant 0\}$ 为状态空间 $E = \{(i,j):i \geqslant 0, 1 \leqslant j \leqslant m\}$ 上的拟生灭过程,简称为 **QBD 过程**.

对应于拟生灭过程,定理 8 ~ 定理 10 可简化为如下定理.

定理 11 不可约的 QBD 过程为正常返的充分必要条件为方程 $\boldsymbol{X}^2\boldsymbol{A}_2 + \boldsymbol{X}\boldsymbol{A}_1 + \boldsymbol{A}_0 = 0$ 的最小非负解 $\boldsymbol{R}$ 的谱半径 $\mathrm{sp}(\boldsymbol{R}) < 1$ 及有唯一的正向量 $\boldsymbol{x}_0$ 满足

$$\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{B}_0 + \boldsymbol{R}\boldsymbol{B}_1) = 0; \quad \boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{e} = 1.$$

定理 12 若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_0 + \boldsymbol{A}_1 + \boldsymbol{A}_2$ 不可约,则 $\boldsymbol{R}$ 的谱半径 $\mathrm{sp}(\boldsymbol{R}) < 1$ 的充分必要条件为

$$\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{e} < \boldsymbol{\pi}\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{e},$$

其中 $\boldsymbol{\pi}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的平稳概率向量.

定理 13 不可约正常返的 QBD 过程的平稳概率向量 $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots)$ 可以表示为

$$x_i = x_0 R^i \qquad (i \geqslant 0).$$

在实际应用中,很多排队系统的状态过程为 QBD 过程,如排队系统 $M/PH/1$, $PH/M/1$, $PH/M/c$, $M/PH/c$, $PH/PH/1$, $PH/PH/c$ 等等. 这些排队系统的队长、等待时间,甚至忙期均可通过它们的状态过程求得. 下面就 **$M/PH/1$ 系统讨论其排队指标.**

设顾客的到达过程为参数 $\lambda(\lambda > 0)$ 的泊松(Poisson) 过程,服务时间分布为具有 v 阶不可约表示$(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{S})$ 的 PH 分布,并设 $\beta_{v+1} = 0$. 令 $I(t)$ 为时刻 t 系统的队长, $J(t)$ 为时刻 t 服务台所处的位相,在 $I(t) = 0$ 时,定义 $J(t) = 0$,则 $M/PH/1$ 系统的状态过程 $\{(I(t), J(t)): t \geqslant 0\}$ 为状态空间

$$E = \{0\} \cup \{(i, j): i \geqslant 1, 1 \leqslant j \leqslant v\}$$

上的拟生灭过程,其无穷小生成子可写成为

$$Q = \begin{bmatrix} -\lambda & \lambda\boldsymbol{\beta} & & & & \\ \boldsymbol{S}^0 & \boldsymbol{S} - \lambda\boldsymbol{I} & \lambda\boldsymbol{I} & & & \\ & \boldsymbol{S}^0\boldsymbol{\beta} & \boldsymbol{S} - \lambda\boldsymbol{I} & \lambda\boldsymbol{I} & & \\ & & \boldsymbol{S}^0\boldsymbol{\beta} & \boldsymbol{S} - \lambda\boldsymbol{I} & \lambda\boldsymbol{I} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}.$$

由定理 11 ~ 13,有下面的定理:

定理 14 $M/PH/1$ 系统平衡的充分必要条件为

$$\rho = \lambda\mu_1' = -\lambda\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{e} < 1.$$

在系统平衡时,其队长分布

$$\boldsymbol{x} = (x_0, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \cdots), \quad x_0 = 1 - \rho, \quad \boldsymbol{x}_i = (1 - \rho)\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{R}^i \qquad (i \geqslant 1),$$

其中

$$\boldsymbol{R} = \lambda(\lambda\boldsymbol{I} - \lambda\boldsymbol{e}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{S})^{-1}.$$

$M/PH/1$ 系统的等待时间、逗留时间、虚等待时间以及忙期的分布都可以基于其状态过程 $\boldsymbol{Q}$,通过构造适当的具有吸收态的 QBD 过程来分别求得. 限于篇幅,在此就不作详细讨论.

8.3 $M/G/1$ 型马氏链与 $PH/G/1$ 系统

定义 8 若状态空间 $E = \{(i, j): i \geqslant 0, 1 \leqslant j \leqslant m\}$ 上马氏链 $\{X_n: n \geqslant 0\}$ 的概率转移矩阵具有如下形式:

$$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{B}_0 & \boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{B}_2 & \cdots \\ \boldsymbol{C}_0 & \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_2 & \cdots \\ & \boldsymbol{A}_0 & \boldsymbol{A}_1 & \cdots \\ & & \boldsymbol{A}_0 & \cdots \\ & & & \ddots \end{bmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{A}_k, \boldsymbol{B}_k, k \geqslant 0$ 及 $\boldsymbol{C}_0$ 均为 $m \times m$ 阶非负矩阵,则称马氏链 $\{X_n: n \geqslant 0\}$ 为 $M/G/1$ 型马氏链. 有时,也称马氏链 P 为 **$M/G/1$ 型马氏链.**

令 $A=\sum_{k=0}^{\infty}A_k$. 若 A 不可约,则存在唯一的正向量 π 使得 $\pi A=\pi$ 及 $\pi e=1$.

记矩阵 G 为方程 $Z=\sum_{i=0}^{\infty}A_iZ^i$ 的最小非负解,并令 $\beta=\sum_{i=1}^{\infty}iA_ie$, $\rho=\pi\beta$,则有如下定理.

定理 15 在 P 不可约时,若 A 不可约,则 G 为随机矩阵的充分必要条件为 $\rho\leqslant 1$.

在 G 为随机矩阵时,矩阵 $[I-\sum_{v=1}^{\infty}A_vG^{v-1}]$ 为非奇异的,从而令

$$H=C_0(I-B_0)^{-1}\sum_{v=1}^{\infty}B_vG^{v-1}+\sum_{v=1}^{\infty}A_vG^{v-1},$$

$$K=B_0+\sum_{k=1}^{\infty}B_kG^{k-1}[I-\sum_{v=1}^{\infty}A_vG^{v-1}]^{-1}C_0,$$

则当 P 不可约,且 G 为随机矩阵时,H,K 均为不可约随机矩阵.

令 G,H,K 唯一正的不变概率向量分别为 g,h,k,记

$$\psi_1=\left(I-A_0-\sum_{v=1}^{\infty}A_vG^{v-1}\right)(I-A+(e-\beta)g)^{-1}e+(1-\rho)^{-1}A_0e,$$

$$\psi_2=e+\left(\sum_{v=1}^{\infty}B_v-\sum_{v=1}^{\infty}B_vG^{v-1}\right)(I-A+(e-\beta)g)^{-1}e+$$

$$(1-\rho)^{-1}\sum_{v=1}^{\infty}(v-1)B_ve,$$

$$\tilde{h}=\psi_1+C_0(I-B_0)^{-1}\psi_2,$$

$$\tilde{k}_1=\psi_2+\sum_{k=1}^{\infty}B_kG^{k-1}\left(I-\sum_{v=1}^{\infty}A_vG^{v-1}\right)^{-1}\psi_v,$$

则有如下定理.

定理 16 对于不可约 $M/G/1$ 型马氏链 P,若 G 不可约,则 P 正常返的充分必要条件为 $\rho<1$ 及矩阵 $\sum_{v=1}^{\infty}vB_v$ 有限.此时,P 的唯一正的不变概率向量为 $(x_0,x_1,x_2,\cdots)$,其中

$$x_0=(k\tilde{k}_1)^{-1}k,$$

$$x_1=(h\tilde{h})^{-1}h,$$

$$x_i=\left[x_0\overline{B}_i+\sum_{j=1}^{v-1}x_j\overline{A}_{v+1-j}\right](I-\overline{A}_1)^{-1}\qquad(i\geqslant 2),$$

其中

$$\overline{A}_v=\sum_{i=v}^{\infty}A_iG^{i-v},$$

$$\overline{B}_v = \sum_{i=v}^{\infty} B_i G^{i-v} \qquad (v \geqslant 0).$$

下面考虑 $PH/G/1$ 系统,说明其状态过程为 $M/G/1$ 型马氏更新过程,并由此来讨论其排队指标.

在 $PH/G/1$ 系统中,设顾客到达时间间隔分布为具有 m 阶不可约表示$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{T})$ 的 PH 分布,其 l 阶矩为$\lambda'_l(l \geqslant 1)$,且 $\alpha_{m+1}=0$.设服务时间分布为 H,l 阶矩为$\mu'_l(l \geqslant 1)$.记 I_n 为第 n 个顾客被服务完离开系统后瞬时系统中的顾客数;J_n 为第 n 个顾客的服务完成时刻到达过程所处的位相;τ_n 为第 n 个顾客所需的服务时间,则 $\{(I_n,J_n,\tau_n):n \geqslant 0\}$ 为状态空间$\{(i,j,x):i \geqslant 0, 1 \leqslant j \leqslant m, x \geqslant 0\}$ 上的马氏更新过程,其概率转移函数矩阵为

$$\boldsymbol{P}(x)=\begin{bmatrix} \boldsymbol{B}_0(x) & \boldsymbol{B}_1(x) & \boldsymbol{B}_2(x) & \cdots \\ \boldsymbol{C}_0(x) & \boldsymbol{A}_1(x) & \boldsymbol{A}_2(x) & \cdots \\ & \boldsymbol{A}_0(x) & \boldsymbol{A}_1(x) & \cdots \\ & & \boldsymbol{A}_0(x) & \cdots \\ & & & \ddots \end{bmatrix}, \tag{8-6}$$

其中对于 $k \geqslant 0, x \geqslant 0$,

$$\boldsymbol{A}_k(x) = \int_{0-}^{x} \boldsymbol{P}(k,u)\mathrm{d}H(u),$$

$$\boldsymbol{B}_k(x) = \int_{0}^{x} \exp(\boldsymbol{T}(x-u))\boldsymbol{T}^0\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}_k(u)\mathrm{d}u,$$

对于任意 $t \geqslant 0$,$\{\boldsymbol{P}(k,t):k \geqslant 0\}$ 由其母函数

$$\boldsymbol{P}^*(z,t) = \sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{P}(k,t)z^k = \exp((\boldsymbol{T}+z\boldsymbol{T}^0\boldsymbol{\alpha})t)(|z| \leqslant 1)$$

唯一确定.

定义 9　称具有概率转移函数矩阵式(8-6)的马氏更新过程 $\boldsymbol{P}(x)$ 为 $\boldsymbol{M/G/1}$ **型马氏更新过程**.显然,其嵌入马氏链 $\boldsymbol{P}(\infty)$ 为 $M/G/1$ 型马氏链.

令 $\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{A}_k(\infty), \boldsymbol{B}_k = \boldsymbol{B}_k(\infty) \qquad (k \geqslant 0)$,

记 $\boldsymbol{A} = \sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{A}_k$,则对于 $k \geqslant 0$,

$$\boldsymbol{B}_k = -\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{T}^0\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{e}\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}_k.$$

定理 17　系统 $PH/G/1$ 的嵌入马氏链 $p(\infty)$ 为正常返的充分必要条件为 $\mu'_1 < \lambda'_1$.在平衡的 $PH/G/1$ 系统中,顾客离开后瞬时所留下的队长分布为

$$\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots),$$

其中

$$\boldsymbol{x}_0 = \theta\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{G},$$

$$\boldsymbol{x}_1 = \theta\left\{\boldsymbol{\alpha}\left[\boldsymbol{I} - \sum_{k=1}^{\infty}\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{G}^{k-1}\right]^{-1} - \boldsymbol{\alpha}\right\},$$

母函数 $\boldsymbol{X}(z) = \sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{x}_k z^k$ 由方程

$$X(z)[zI - A^*(z)] = \theta\alpha[zI - G]A^*(z) \qquad (|z| \leqslant 1)$$

确定,此处

$$\theta = (\lambda'_1 - \mu'_1)[\alpha G(-T^{-1}e)]^{-1},$$

$$A^*(z) = \int_{0-}^{\infty} \exp((T + zT^0\alpha)u)\mathrm{d}H(u) \qquad (|z| \leqslant 1).$$

进一步,在任意服务完成时刻,顾客到达位相的条件概率分布为

$$X(1) = \pi - \theta(I - G)AZ,$$

其中 $Z = (I - A + e\pi)^{-1}$;π 为 A 的左不变概率向量.

定理 18 在平衡 $PH/G/1$ 系统中,任意时刻 t 的极限队长分布为

$$y = (y_0, y_1, y_2, \cdots),$$

且

$$y_0 = \lambda_1'^{-1}\theta\alpha G(-T^{-1}),$$

$$y_k = (x_{k-1}e)\pi + \lambda_1'^{-1}(x_k - x_{k-1})(-T^{-1}) \qquad (k \geqslant 1),$$

其中 $\theta, x_k, k \geqslant 0$ 均由定理 17 给出.

推论 2

$$\sum_{k=0}^{\infty} y_k = \pi.$$

9 排队网络

9.1 串联排队网络

假设有一个有 M 个节点,节点 i 有 c_i 个服务台的**串联排队网络**,$i = 1,2,\cdots,M$.在串联排队网络中设所有节点的服务相互独立,节点 i 的 c_i 个服务台的服务时间均服从参数为 μ_i 的负指数分布,$i = 1,2,\cdots,M$.顾客按参数为 λ 的泊松过程到达系统,并依次在第一个节点,第二个节点,…,第 M 个节点分别任选一个空着的服务台接受服务,在第 M 个节点接受完服务后离开整个系统,并设每个节点前面的排队空间无限.对于此网络,令

$$\rho_i = \frac{\lambda}{c_i\mu_i} \qquad (i = 1,2,\cdots,M),$$

$$\rho = \sum_{i=1}^{M} \rho_i.$$

若 $\rho < 1$,则网络是平稳的.在网络平稳时,记节点 i 前面的队长为 n_i,$i = 1,2,\cdots,M$,则网络的平稳队长概率分布为

$$p(n) = \prod_{i=1}^{M} p_i(n_i),$$

其中

$$n = (n_1, n_2, \cdots, n_M);$$

$$p_i(n_i) = \begin{cases} \dfrac{(c_i\rho_i)^{n_i}}{n_i!} b_i & (n_i \leqslant c_i), \\ \dfrac{(c_i\rho_i)^{n_i}}{c_i!\, c_i^{n_i - c_i}} b_i & (n_i > c_i); \end{cases}$$

$$b_i = \left(\sum_{j=0}^{c_i - 1} \frac{(c_i\rho_i)^j}{j!} + \frac{(c_i\rho_i)^{c_i}}{c_i!} \frac{1}{1 - \rho_i} \right)^{-1} \qquad (i = 1,2,\cdots,M).$$

9.2 杰克逊开网

设网络有 M 个节点,顾客以参数为 λ_i 的泊松过程从外部到达节点 i, $i = 1,2,\cdots M$.顾客在节点 i 结束服务后,以概率 r_{ij} 转移到节点 j 接受服务,以概率 $1 - \sum_{j=1}^{M} r_{ij}$ 离开网络, $i,j = 1,2,\cdots,M$.设节点 i 有 c_i 个相互独立的服务台,它们的服务时间均服从参数为 μ_i 的负指数分布, $i = 1,2,\cdots,M$.并设所有节点的服务相互独立,每个节点前面的排队空间无限,此网络称为**杰克逊**(D.Jackson) **开网**.

记 $\sigma_i (i = 1,2,\cdots,M)$ 为方程组

$$\sigma_i = \lambda_i + \sum_{j=1}^{M} \sigma_j r_{ji} \qquad (i = 1,2,\cdots,M)$$

的一组非负解(这组解是存在的,只要假定所有的顾客都会离开系统,参看文献[2]).令

$$\rho_i = \frac{\sigma_i}{c_i \mu_i} \qquad (i = 1,2,\cdots,M),$$

如果对于所有的 $i = 1,2,\cdots,M$, $\rho_i < 1$,那么网络为平稳的.在网络平稳时,记节点 i 前面的队长为 n_i, $i = 1,2,\cdots,M$,则网络的平稳队长概率分布为

$$p(\boldsymbol{n}) = \prod_{i=1}^{M} p_i(n_i),$$

其中

$$\boldsymbol{n} = (n_1, n_2, \cdots, n_M);$$

$$p_i(n_i) = \begin{cases} \dfrac{(c_i\rho_i)^{n_i}}{n_i} b_i & (n_i \leqslant c_i), \\ \dfrac{(c_i\rho_i)^{n_i}}{c_i!\, c_i^{n_i - c_i}} b_i & (n_i > c_i); \end{cases}$$

$$b_i = \left[\sum_{j=0}^{c_i - 1} \frac{(c_i\rho_i)^j}{j!} + \frac{(c_i\rho_i)^{c_i}}{c_i!} \frac{1}{1 - \rho_i} \right]^{-1} \qquad (i = 1,2,\cdots,M).$$

9.3 杰克逊闭网

设网络有 M 个节点,节点 i 有 c_i 个相互独立的服务台,各服务台的服务时间分

布均为参数为 μ_i 的负指数分布,所有节点的服务相互独立,$i=1,2,\cdots,M$.网络中的顾客总数永远为 N,网络外部的顾客不能进入网络,网络内部的顾客也不能离开网络.顾客在节点 i 结束服务后以概率 r_{ij} 转移到节点 j 接受服务,且 $\sum_{j=1}^{M} r_{ij}=1,i,j=1,2,\cdots,M$.此网络称为**杰克逊闭网**.

杰克逊闭网的状态空间

$$E=\{\boldsymbol{n}=(n_1,n_2,\cdots,n_M):\sum_{i=1}^{M} n_i=N,0\leqslant n_i\leqslant N,i=1,2,\cdots,M\}$$

为有限的状态空间,其中 n_i 为节点 i 前面的队长,$i=1,2,\cdots M$.因此,杰克逊闭网总是平稳的.

记 $\sigma_i(i=1,2,\cdots,M)$ 为方程组

$$\sigma_i=\sum_{j=1}^{M}\sigma_j r_{ji}\qquad(i=1,2,\cdots,M)$$

的一组非负解,令

$$\rho_i=\frac{\sigma_i}{c_i\mu_i}\qquad(i=1,2,\cdots,M),$$

则杰克逊闭网的平稳队长概率分布为

$$p(\boldsymbol{n})=b_N\prod_{i=1}^{M}p_i(n_i)\qquad(\boldsymbol{n}\in E),$$

其中

$$p_i(n_i)=\begin{cases}\dfrac{(c_i\rho_i)^{n_i}}{n_i!} & (n_i\leqslant c_i),\\[2ex] \dfrac{(c_i\rho_i)^{n_i}}{c_i!\,c_i^{n_i-c_i}} & (n_i>c_i);\end{cases}$$

$$b_N=\Big[\sum_{\boldsymbol{n}\in E}\prod_{i=1}^{M}p_i(n_i)\Big]^{-1}\qquad(i=1,2,\cdots,M).$$

9.4 BCMP 网络

设网络有 M 个节点,顾客有 R 种型.一个 r 型的顾客随过程的进展可属于有限类集 C_r 中的不同的类.假定 C_r 可分成一些子类集 C_{ir},

$$C_r=\bigcup_{i=1}^{M}C_{ir}\qquad(1\leqslant r\leqslant R,1\leqslant i\leqslant M),$$

其中 C_{ir} 为 r 型顾客在节点 i 所属的子类集.设 r 型 c 类的顾客在节点 i 接受完服务后,以 d 类进入节点 j 的概率为 $P_{ic,jd}^{(r)}$,离开网络的概率为

$$P_{ic,0}^{(r)}=1-\sum_{j=1}^{M}\sum_{d\in C_{jr}}P_{ic,jd}^{(r)}\qquad(c\in C_{ir},d\in C_{jr},1\leqslant r\leqslant R,1\leqslant i,j\leqslant M).$$

并设 r 型 c 类顾客在节点 i 的平均服务时间为 $m_{ic}^{(r)}$,$c\in C_{ir}$,$1\leqslant r\leqslant R$,$1\leqslant i\leqslant M$,

则概率转移矩阵

$$P^{(r)} = [p_{ic,jd}^{(r)} : c \in C_{ir}, d \in C_{jr}, 1 \leqslant i, j \leqslant N]$$

称为 r 型顾客的路径链，r 型的顾客又称为 r 链顾客，$1 \leqslant r \leqslant R$. 因此，多型顾客的 BCMP 网络称为多链排队网络.

设 r 型 c 类顾客按参数为 $\lambda_{ic}^{(r)}$ 的泊松过程到达节点 i，$c \in C_{ir}$，$1 \leqslant r \leqslant R$，$1 \leqslant i \leqslant M$. 若存在 $c' \in C_{ir}$ 及 $i' \in \{1,2,\cdots,M\}$，使得 $\lambda_{i'c'}^{(r)} > 0$，则称路径链 r 是开的；若对于所有的 $c \in C_{ir}$ 及 $i \in \{1,2,\cdots,M\}$，使得 $\lambda_{ic}^{(r)} = 0$，则称路径链 r 为闭的. 所有路径链都是闭的网络称为闭网.

网络节点的服务规则可以是，先到先服务（FCFS），共享服务（PS，指服务台将服务时间平均分配给系统中的顾客，这些顾客轮流接受服务，且每次只接受一个充分小的单位量时间），后到占优先服务（LCFSPR，指服务台在顾客到达时总是立即中断当前的服务，来为新到顾客进行服务，而被中断服务的顾客在以后轮到服务时从他已经历过的服务时间的基础上继续下去），以及无穷服务台（IS）等情形. 若节点 i 按先到先服务规则，则其服务时间需要服从以参数为 $m_{ic}^{(r)}$ 的负指数分布，$c \in C_{ir}$，$1 \leqslant r \leqslant R$，$1 \leqslant i \leqslant M$. 若节点 i 按共享服务、后到占优先服务或有无穷服务台，则其服务时间的分布只需具有有理拉普拉斯（Laplace）变换即可. 因此，节点 i 按上述服务规则服务时，其服务时间的分布可以是负指数分布、超指数分布、埃尔朗分布，以及一般的 PH 分布. 具有以上特点的网络就称为 **BCMP 网络**.

记 $\alpha_{ic}^{(r)}$，$c \in C_{ir}$，$1 \leqslant r \leqslant R$，$1 \leqslant i \leqslant M$ 为方程组

$$\alpha_{ic}^{(r)} = \lambda_{ic}^{(r)} + \sum_{j=1}^{M} \sum_{d \in C_{jr}} \alpha_{jd}^{(r)} p_{jd,ic}^{(r)}, c \in C_{ir} \qquad (1 \leqslant r \leqslant R, 1 \leqslant i \leqslant M)$$

的一组非负解，令

$$\sigma_{ir} = \sum_{c \in C_{ir}} \alpha_{ic}^{(r)}, \tag{9-1}$$

$$\tau_{ir} = \sum_{c \in C_{ir}} \frac{\alpha_{ic}^{(r)} m_{ic}^{(r)}}{\sigma_{ir}}, \tag{9-2}$$

$$\omega_{ir} = \sigma_{ir} \tau_{ir} \qquad (1 \leqslant r \leqslant R, 1 \leqslant i \leqslant M), \tag{9-3}$$

则称 ω_{ir} 为节点 i 对 r 型顾客的相对服务强度

BCMP 网络的状态空间为

$$E = \{\boldsymbol{n} = (\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{n}_2, \cdots, \boldsymbol{n}_M) : \boldsymbol{n}_i = (n_{i1}, n_{i2}, \cdots, n_{ik}),$$
$$n_{ir} \geqslant 0, 1 \leqslant r \leqslant R, 1 \leqslant i \leqslant M\},$$

其中 n_{ir} 为节点 i 前面的 r 型顾客总数；记 $n_i = \sum_{r=1}^{R} n_{ir}$，则 n_i 为节点 i 前面所有顾客总数.

因此，在 BCMP 网络平稳时，各节点各型顾客数的平稳概率分布为

$$\pi(\boldsymbol{n}) = G \prod_{i=1}^{M} f_i(\boldsymbol{n}_i),$$

其中

$$f_i(\boldsymbol{n}_i)=\begin{cases}n_i!\prod_{r=1}^{R}\dfrac{\omega_{ir}^{n_{ir}}}{n_{ir}!} & \text{(节点 } i \text{ 的服务规则为 FCFS,PS 或 LCFSPR)},\\ \prod_{r=1}^{R}\dfrac{\omega_{ir}^{n_{ir}}}{n_{ir}!} & \text{(节点 } i \text{ 有无穷服务台)}\end{cases}\quad (1\leqslant i\leqslant M);\tag{9-4}$$

$$G=\Big[\sum_{\boldsymbol{n}\in E}\prod_{i=1}^{M}f_i(\boldsymbol{n}_i)\Big]^{-1}.$$

需要指出,对于闭网,平稳分布恒存在;而对于非闭网,平稳分布存在的充分条件为 $G^{-1}<\infty$.

下面讨论几种推广的 BCMP 网络.

(1) 顾客由外部到达网络的泊松过程的总到达率为 $\lambda(x)$,它依赖于网络中的顾客总数

$$x=\sum_{i=1}^{M}n_i.$$

设 r 型顾客由外部以 c 类到达节点 i 的概率为 $P_{0,ic}^{(r)}$, $c\in C_{ir}$, $1\leqslant r\leqslant R$, $1\leqslant i\leqslant M$,且有

$$\sum_{r=1}^{R}\sum_{i=1}^{M}\sum_{c\in C_{ir}}P_{0,ic}^{(r)}=1.$$

记 $\alpha_{ic}^{(r)}(c\in C_{ir},1\leqslant r\leqslant R,1\leqslant i\leqslant M)$ 为方程组

$$\alpha_{ic}^{(r)}=p_{0,ic}^{(r)}+\sum_{j=1}^{M}\sum_{d\in C_{jr}}\alpha_{jd}^{(r)}p_{jd,ic}^{(r)}\qquad(c\in C_{ir},1\leqslant r\leqslant R,1\leqslant i\leqslant M)$$

的一组非负解,并以此代替式(9-1)、式(9-2)中的 $\alpha_{ic}^{(r)}$, $c\in C_{ir}$, $1\leqslant r\leqslant R$, $1\leqslant i\leqslant M$,则在此网络平稳时,其平稳概率分布为

$$\pi(\boldsymbol{n})=G_1d(\boldsymbol{n})\prod_{i=1}^{M}f_i(\boldsymbol{n}_i),$$

其中 $f_i(\boldsymbol{n}_i)(1\leqslant i\leqslant M)$ 由式(9-4)给出,

$$\begin{aligned}d(\boldsymbol{n})&=\prod_{k=0}^{\sum_{i=1}^{M}n_i-1}\lambda(k),\\ G_1&=\Big[\sum_{\boldsymbol{n}\in E}d(\boldsymbol{n})\prod_{i=1}^{M}f_i(\boldsymbol{n}_i)\Big]^{-1}.\end{aligned}\tag{9-5}$$

(2) r 型顾客由外部到达网络的泊松过程的总到达率为 $\lambda_r(x)$,它依赖于网络中 r 型顾客总数 $x=n^{(r)}=\sum_{i=1}^{M}n_{ir}$.

设 r 型顾客由外部以 c 类到达节点 i 的概率为 $q_{o,ic}^{(r)}$, $c\in C_{ir}$, $1\leqslant r\leqslant R$, $1\leqslant i\leqslant M$,且有

$$\sum_{i=1}^{M}\sum_{c\in C_{ir}}q_{o,ic}^{(r)}=1\qquad(r=1,2,\cdots,R).$$

记 $\alpha_{ic}^{(r)}(c \in C_{ir}, 1 \leqslant r \leqslant R, 1 \leqslant i \leqslant M)$ 为方程组

$$\alpha_{ic}^{(r)} = q_{o,ic}^{(r)} + \sum_{j=1}^{M} \sum_{d \in C_{jr}} \alpha_{jd}^{(r)} p_{jd,ic}^{(r)} \qquad (c \in C_{ir}, 1 \leqslant r \leqslant R, 1 \leqslant i \leqslant M)$$

的一组非负解，并以此代替式(9-1)、式(9-2)中的 $\alpha_{ic}^{(r)}, c \in C_{ir}, 1 \leqslant r \leqslant R, 1 \leqslant i \leqslant M$，则在网络平稳时，其平稳概率分布为

$$\pi(\boldsymbol{n}) = G_1 d(\boldsymbol{n}) \prod_{i=1}^{M} f_i(\boldsymbol{n}_i),$$

其中 $f_i(\boldsymbol{n}_i), 1 \leqslant i \leqslant M$ 由式(9-4)给出；G_1 由式(9-5)给出；

$$d(\boldsymbol{n}) = \prod_{r=1}^{R} \prod_{k=0}^{n^{(r)}-1} \lambda_r(k).$$

(3) 在服务规则 FCFS, PS 或 LCFSPR 下，网络节点 i 的服务率依赖于其前面的顾客数.

设节点 i 前面有 n_i 个顾客时其服务率为 $\mu_i(n_i), 1 \leqslant i \leqslant M$，则网络在平稳时，其平稳概率分布为

$$\pi(\boldsymbol{n}) = G \prod_{i=1}^{M} \frac{f_i(\boldsymbol{n}_i)}{\prod_{k=1}^{n_i} \mu_i(k)},$$

其中 $f_i(\boldsymbol{n}_i)(1 \leqslant i \leqslant M)$ 由式(9-4)给出.

设节点 i 前面 r 型顾客数为 n_{ir} 时其服务率为 $\mu_{ir}(n_{ir}), 1 \leqslant r \leqslant R, 1 \leqslant i \leqslant M$，则在网络平稳时，其平稳概率分布为

$$\pi(\boldsymbol{n}) = G \prod_{i=1}^{M} \frac{f_i(\boldsymbol{n}_i)}{\prod_{r=1}^{R} \prod_{k=1}^{n_{ir}} \mu_{ir}(k)},$$

其中 $f_i(\boldsymbol{n}_i)(1 \leqslant i \leqslant M)$ 由式(9-4)式给出.

9.5 拟逆排队网络

假设有一个具有 C 类顾客、不同类顾客要求不同的服务时间的排队系统. 设其状态过程为状态空间 E 上具有无穷小生成子 $\boldsymbol{Q} = [q_{ij}]$ 的马氏过程 $\{X(t): t \geqslant 0\}$，平稳概率分布向量为 $\boldsymbol{\pi}$.

对于 $c \in C$ 记

$A_c = \{(i,j)$: 由状态 i 到状态 j 的转移为一个 c 类顾客到达系统, $i, j \in E\}$,

$D_c = \{(i,j)$: 由状态 i 到状态 j 的转移为一个 c 类顾客离开系统, $i, j \in E\}$,

则有下面的定理.

定理 1 若上述系统已处于平稳(如取初始分布为 π)，则未来的到达独立于系统当前状态的充分必要条件为存在一组 $\lambda_c, c \in C$，使

$$\lambda_c = \sum_{j \in E} q_{ij} I_{\{(i,j) \in A_c\}} \qquad (i \in E, c \in C). \tag{9-6}$$

此时,对于 $c \in C$,所有这些 c 类顾客的到达过程相互独立,分别为具有参数 λ_c 的泊松过程.

定理 2　若上述系统已处于平稳(如取初始分布为 π),则过去的离开独立于系统当前状态的充分必要条件为存在一组 $\tilde{\lambda}_c, c \in C$,使

$$\tilde{\lambda}_c \pi_j = \sum_{i \in E} \pi_i q_{ij} I_{\{(i,j) \in D_c\}} \qquad (j \in E, c \in C). \tag{9-7}$$

此时,对于 $c \in C$,所有这些 c 类顾客离开系统的过程相互独立,分别为具有参数 $\tilde{\lambda}_c$ 的泊松过程.

定义 1　如果一个排队系统的状态过程是一个具有平稳分布 π 的马氏过程 Q,同时存在一组 $\lambda_c, \tilde{\lambda}_c (c \in C)$ 使式(9-6)和式(9-7)成立,则此系统称为**拟逆排队系统**.

由上面的定理 1 与定理 2 可知,拟逆排队系统定义中的条件式(9-6)与式(9-7)可改为未来的到达独立于当前的状态,同时过去的离开也独立于当前的状态.另外,对于拟逆排队系统,各类顾客的到达与各类顾客的离开均为相互独立的泊松过程.

容易验证多类顾客的 $M/M/1$, $M/PH/1$-PS, $M/PH/1$-LCFSPR 与 $M/PH/\infty$ 系统以及服务时间服从 PH 分布的 BCMP 网络均为拟逆排队系统.下面介绍一个更为一般的拟逆排队系统——凯利(Kelly)对称排队系统.

设在该系统中共有 C 类顾客.对于 $c \in C$, c 类顾客以相互独立的、参数为 λ_c 的泊松过程到达系统,服务时间服从具有 m 阶表示 $(\boldsymbol{\alpha}_c, S_c)$ 的 PH 分布,且

$$\boldsymbol{\alpha}_c \boldsymbol{e} = 1, \quad \mu_c^{-1} = -\boldsymbol{\alpha}_c S_c^{-1} \boldsymbol{e} < \infty \qquad (c \in C).$$

在该系统中有 n 个顾客时,记系统的状态为

$$\boldsymbol{x} = \begin{cases} 0 & (n = 0), \\ (c_1, \phi_1; c_2, \phi_2; \cdots; c_n, \phi_n) & (n \geq 1), \end{cases}$$

其中 c_l, ϕ_l 分别为第 l 个位置顾客的类型和其服务所处的位相, $1 \leq l \leq n$.在此状态下,一个到达的顾客在 l 位置加入排队的概率假定为

$$r_{n+1,l} \geq 0 \qquad (1 \leq l \leq n+1),$$

且

$$\sum_{l=1}^{n+1} r_{n+1,l} = 1 \qquad (n \geq 0);$$

而服务台的总服务率假定为 $\psi(n)$,并按 $r_{n,l}$ 比率分配到第 l 位置上的顾客, $1 \leq l \leq n$,则此排队系统称为**凯利对称排队系统**.可以看出, $M/PH/1$ 的 PS, $M/PH/1$ 的 LCFSPR 与 $M/PH/\infty$ 系统都是凯利对称排队系统的特例[14].

定理 3　对于凯利对称排队系统,令

$$\lambda = \sum_{c \in C} \lambda_c, \quad \rho = \sum_{c \in C} \lambda_c \mu_c^{-1},$$

$$p(c, \phi) = \frac{\lambda_c \mu_c^{-1}}{\rho} v_c(\phi),$$

其中 m 维行向量

$\boldsymbol{\nu}_c=(\upsilon_c(1),\upsilon_c(2),\cdots,\upsilon_c(m))$为$(\boldsymbol{S}_c+\boldsymbol{S}_c^0\boldsymbol{\alpha}_c)$的平稳概率分布向量,$c\in C,1\leqslant\phi\leqslant m$.若存在正常数$A$使得

$$\pi(c_1,\phi_1;c_2,\phi_2;\cdots;c_n,\phi_n)=A\frac{\rho^n}{\psi(1)\psi(2)\cdots\psi(n)}\prod_{l=1}^{n}p(c_l,\phi_l)\qquad(n\geqslant 0)\tag{9-8}$$

规范化,则规范化的π为凯利对称排队系统的平稳概率分布向量.此外,平稳的凯利对称排队系统为拟逆的.

假设有一个有M个节点C类顾客的排队网络,设其c类顾客在节点i接受完服务后,以d类进入节点j的概率为r_{ij}^{cd},则离开系统的概率为

$$r_{i0}^{c}=1-\sum_{j=1}^{M}\sum_{d\in C}r_{ij}^{cd}\qquad(c,d\in C,1\leqslant i,j\leqslant M).$$

设系统外面的顾客以参数为γ的泊松过程进入网络,到达的顾客作为c类进入节点i的概率为r_{0i}^{c},$c\in C,1\leqslant i\leqslant M$,则通过节点$i$的$c$类顾客的平均率$\lambda_i^c$满足方程

$$\lambda_i^c=\gamma r_{0i}^{c}+\sum_{j=1}^{M}\sum_{d\in C}\lambda_j^d r_{ji}^{dc}\qquad(c\in C,1\leqslant i\leqslant M).\tag{9-9}$$

若网络的每个节点所对应的排队系统在孤立考虑时均为拟逆的,则称此网络为**拟逆排队网络**.

需要指出,这里的定义是直观的,真正严格的定义要用描写网络的马氏过程的无穷小生成子来给定[14].对于拟逆排队网络,有下列定理:

定理4 平稳的拟逆排队网络具有乘积型平稳概率分布,即其分布为各节点所对应的拟逆排队系统平稳概率分布的乘积,其中c类顾客到达节点i的到达率$\lambda_i^c(c\in C,1\leqslant i\leqslant M)$由式(9-9)给出.

10 重要的指标关系与逼近理论

10.1 重要的指标关系

10.1.1 不同时刻的各种队长分布

假设有一个输入输出系统(可指整个随机服务系统,或只指排队部分,或只指服务部分),令q_m为第m个顾客到达前瞬时系统中顾客的总数,q'_m为第m个离开系统的顾客离开后瞬时系统中顾客的总数,$q(t)$为在时刻t处在系统中顾客的总数.对于这种系统,有下面的定理和推论.

定理1 对于顾客单个到达和单个离开的输入输出系统,对于任一$j,j=0,1,\cdots$,只要极限$\lim\limits_{m\to\infty}P\{q_m=j\}$与$\lim\limits_{m\to\infty}P\{q'_m=j\}$之一存在,则另一个也存在,且

$$\lim_{m\to\infty}P\{q_m=j\}=\lim_{m\to\infty}P\{q'_m=j\}.$$

因而只要 q_m 或 q'_m 存在极限分布，则二者的极限分布均存在，且相同.

定理 2 对于输入为最简单流的输入输出系统，对于任一 $j, j = 0,1,2,\cdots$，只要极限 $\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\}$ 存在，则极限 $\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\}$ 也存在，且

$$\lim_{t\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\}.$$

因而只要 $q(t)$ 存在极限分布，则 q_m 的极限分布也存在，且相同.

由定理 1 和定理 2，有如下推论.

推论 1 对于输入为最简单流、单个到达、单个离开的输入输出系统，对于任一 $j, j = 0,1,2,\cdots$，只要极限 $\lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\}$ 存在，则极限 $\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\}$ 与 $\lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\}$ 也存在，且

$$\lim_{m\to\infty} P\{q_m = j\} = \lim_{m\to\infty} P\{q'_m = j\} = \lim_{t\to\infty} P\{q(t) = j\}.$$

因而只要 $q(t)$ 存在极限分布，则 q_m, q'_m 的极限分布均存在，且二者相同.

10.1.2 利特尔公式

假设有一个输入输出系统. 顾客在时刻 $\tau_1, \tau_2, \cdots (0 = \tau_0 \leqslant \tau_1 \leqslant \tau_2 \leqslant \cdots)$ 相继进入系统，他们在系统中的逗留时间分别为 $u_1, u_2, \cdots$. 令 $q(t)$ 为时刻 t 在系统中的顾客总数，$N(t)$ 为 $[0, t]$ 内进入系统的顾客总数，即

$$N(t) = \max_{i\geqslant 0}\{i \mid \tau_i \leqslant t\}.$$

再令

$$\lambda = \lim_{T\to\infty} \frac{N(T)}{T},$$

$$Q = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T q(t)\mathrm{d}t,$$

$$U = \lim_{m\to\infty} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} u_i,$$

则有如下定理及推论，其中所有公式都称为**利特尔**(J.D.C.Little) **公式**.

定理 3 对于上述的输入输出系统，若极限 λ, U 均以概率 1 存在且有限，则 Q 也以概率 1 存在且有限，同时 $Q = \lambda U$ 以概率 1 成立.

推论 2 对于输入为 GI 的单个到达单个服务的等待制的随机服务系统，在平衡情形下，恒有

$$Eq = \lambda E\widehat{u}, \quad Eq_w = \lambda E\widehat{w},$$

$$Eq_s = \frac{\lambda}{\mu}, \quad Eq = Eq_w + \frac{\lambda}{\mu},$$

其中 $q, q_w, q_s, \widehat{\mu}, \widehat{\omega}$ 分别为平衡情形下的任意时刻队长、任意时刻的等待队长，任意时刻被占用的服务台数，顾客的逗留时间与顾客的等待时间；λ 为单位时间内平均到达的顾客数；$\frac{1}{\mu}$ 为平均服务时间.

推论 3 对于输入为 GI 的单个到达、单个服务的混合制或损失制随机服务系

统,在平衡情形下,恒有

$$Eq = \lambda(1-\hat{\Pi})E\hat{\tilde{u}},$$

$$Eq_w = \lambda(1-\hat{\Pi})E\hat{\tilde{w}},$$

$$Eq_s = \frac{\lambda}{\mu}(1-\hat{\Pi}),$$

$$Eq = Eq_w + \frac{\lambda}{\mu}(1-\hat{\Pi}),$$

其中$\hat{\Pi}$为平衡情形下的顾客到达时遭到损失的概率;$\hat{\tilde{u}}$与$\hat{\tilde{w}}$分别为平衡情形下的未遭损失顾客的逗留时间与等待时间;其他各量的含义同推论 2.

10.2　逼近理论

10.2.1　上下界

定理4　在平衡的 $GI/G/1$ 系统($\rho=\dfrac{\lambda}{\mu}<1$)中,平均等待时间 $E\hat{w}$具有上界.

$$E\hat{w} \leqslant \lambda\frac{\sigma_t^2+\sigma_v^2}{2(1-\rho)}, \tag{10-1}$$

其中$\dfrac{1}{\lambda}$,σ_t^2分别为到达间隔t的均值与方差;$\dfrac{1}{\mu}$,σ_v^2分别为服务时间 v 的均值与方差.此上界表达式当$\rho\uparrow 1$($\rho<1$但$\rho\to 1$)时就是$E\hat{w}$的近似式,即此上界在饱和服务($\rho\uparrow 1$)情形下误差最小.$E\hat{w}$的下界有如下两种形式:

$$E\hat{w} \geqslant \lambda\frac{E\{(u^+)^2\}}{2(1-\rho)}, \tag{10-2}$$

$$E\hat{w} \geqslant l, \tag{10-3}$$

其中 $u^+=\max(0,u)$, $u=v-t$;l 为方程

$$l=\int_{-l}^{\infty}P\{u\geqslant x\}\,\mathrm{d}x$$

在$[0,\infty)$内的唯一解.式(10-2)所得的下界在饱和服务($\rho\uparrow 1$)情形下误差较小,而式(10-3)所得的下界在低负荷服务($\rho\downarrow 0$)情形下误差较小.

定理5　对于 $GI/G/n$ 系统,在平衡情形($\rho=\dfrac{\lambda}{n\mu}<1$)下,平均等待时间 $E\hat{w}$具有如下上下界:

$$E\hat{w}_1-\frac{n-1}{2n}\mu\left(\sigma_v^2+\frac{1}{\mu^2}\right)\leqslant E\hat{w}\leqslant\lambda\frac{\sigma_t^2+\frac{1}{n}\sigma_v^2}{2(1-\rho)},$$

其中 $E\hat{w}_1$ 为到达间隔为 t,服务时间为 v/n 的平衡 $GI/G/1$ 系统的平均等待时间,t

与 v 是指所考虑的 $GI/G/n$ 系统的到达间隔与服务时间. 特别地, 可用式(10-2) 或式(10-3) 来计算这里的 $E\widehat{w}_1$ 的下界, 但注意要以 v/n 来代替原来的 v.

10.2.2 近似分布

定理 6(饱和服务逼近) 对于平衡的 $GI/G/1$ 系统, 在饱和服务的情形下, 等待时间分布有下列近似公式:

$$P\{\widehat{w} \leqslant x\} \approx 1 - \exp\left(-\frac{2(1-\rho)}{\lambda(\sigma_t^2 + \sigma_v^2)} x\right) \qquad (x \geqslant 0).$$

因而平均等待时间有下列近似公式:

$$E\widehat{w} \approx \frac{\lambda(\sigma_t^2 + \sigma_v^2)}{2(1-\rho)},$$

其中 $\frac{1}{\lambda}$, σ_t^2 分别为到达间隔 t 的均值与方差; $\frac{1}{\mu}$, σ_v^2 分别为服务时间的均值与方差.

推论 4 对于平衡的 $M/G/1$ 系统, 在饱和服务情形下, 等待时间分布有如下近似式:

$$P\{\widehat{w} \leqslant x\} \approx 1 - \exp\left(-\frac{2(1-\rho)x}{\lambda(\sigma_v^2 + \mu^{-2})}\right) \qquad (x \geqslant 0). \qquad (10\text{-}4)$$

定理 7 (饱和服务逼近) 对于平衡的 $GI/G/n$ 系统, 在饱和服务的情形下, 等待时间分布的近似式为

$$P\{\widehat{w} \leqslant x\} \approx 1 - \exp\left(-\frac{2(1-\rho)x}{\lambda(\sigma_t^2 + \sigma_v^2 n^{-2})}\right) \qquad (x \geqslant 0),$$

因而, 平均等待时间有下列近似式:

$$E\widehat{w} \approx \frac{\lambda(\sigma_t^2 + \sigma_v^2 n^{-2})}{2(1-\rho)},$$

其中各量的含义与定理 6 相同.

定理 8 (扩散逼近) 对于 $GI/G/1$ 系统, 在平衡情形($\rho = \frac{\lambda}{\mu} < 1$)下, 虚等待时间的近似分布为

$$P\{w \leqslant x\} \approx 1 - \exp\left(-\frac{2(1-\rho)x}{\lambda(\sigma_v^2 + \rho^2\sigma_t^2)}\right) \qquad (x \geqslant 0),$$

因而虚等待时间的均值有下列近似式:

$$Ew \approx \frac{\lambda(\sigma_v^2 + \rho^2\sigma_t^2)}{2(1-\rho)},$$

其中各量的定义如定理 6 所给. 此处的近似关系式在饱和服务情形下较为精确.

推论 5 对于平衡的 $M/G/1$ 系统, 在饱和情形下, 等待时间与虚等待时间的分布具有相同的近似式(10-4).

定理 9 (扩散逼近) 对于 $GI/G/1$ 系统, 假定初始虚等待时间 $w(0) = \omega_0$ 为一常数, 则虚等待时间 $w(t)$ 的近似分布为

$$P\{w(t)\leqslant x\}\approx\Phi\left(\frac{x-\omega_0+(1-\rho)t}{\sqrt{\lambda t(\sigma_v^2+\rho^2\sigma_t^2)}}\right)-\exp\left(-\frac{2(1-\rho)x}{\lambda(\sigma_v^2+\rho^2\sigma_t^2)}\right)\cdot$$
$$\Phi\left(\frac{-x-\omega_0+(1-\rho)t}{\sqrt{\lambda t(\sigma_v^2+\rho^2\sigma_t^2)}}\right)\qquad(x\geqslant 0),\qquad(10\text{-}5)$$

其中 $\Phi(u)$ 为标准正态分布函数;其他各量的含义与定理6相同.

若初始虚等待时间 $w(0)=\omega_0$ 为一随机变量,则将式(10-5)对 ω_0 的分布函数积分,即得 $w(t)$ 的近似分布.

定理10(扩散逼近) 对于 $GI/G/1$ 系统,在平衡情形($\rho=\frac{\lambda}{\mu}<1$)下,任意时刻队长 q 有如下近似分布:

$$P\{q=j\}=\begin{cases}1-\rho & (j=0),\\ \rho(1-\hat{\rho})\hat{\rho}^{j-1} & (j=1,2,\cdots),\end{cases}$$

其中 $\hat{\rho}=\exp\left(-\frac{2(1-\rho)}{\rho c_t^2+c_v^2}\right)$,而 $c_t=\lambda\sigma_t$ 与 $c_v=\mu\sigma_v$ 分别为到达间隔与服务时间的变异系数,此处 $\frac{1}{\lambda}$ 与 σ_t^2 分别为到达间隔的均值与方差,$\frac{1}{\mu}$ 与 σ_v^2 分别为服务时间的均值与方差.这里的近似关系在饱和服务情形下($\rho\uparrow 1$)较为精确.

参考文献

1 徐光辉著.随机服务系统.第二版.北京:科学出版社,1988.
2 徐光辉主编.运筹学基础手册.北京:科学出版社,1999.
3 Cohen J W.The single server queue.2nd ed.Amsterdam:North-Holland,1981.
4 Conway A E,Georganas N D.Queueing networks-Exact computational algorithms.Cambridge:MIT,1989.
5 Cooper R B.Introduction to queueing theory.2nd ed.London:Edward Arnold,1981.
6 Disney R L,Kiessler P C.Traffic processes in queueing networks.Baltimore:Johns Hopkins,1987.
7 Dshalalow J H.Advances in queueing.Boca Raton:CRC,1995.
8 Heyman D P,Sobel M J.Stochastic models.Amsterdam:North-Holland,1990.
9 Kelly F P.Reversibility and stochastic networks.New York:John Wiley & Sons,1979.
10 Kleinrock L.Queueing systems,Vol.Ⅰ,Ⅱ.New York:John Wiley & Sons,1975,1976.
11 Neuts M F.Matrix-Geometric solutions in stochastic models.Baltimore:Johns Hopkins,1981.
12 Neuts M F.Structured stochastic matrices of $M/G/1$ type and their applications.New York:Marcel Dekker,1989.
13 Takács L.Introduction to the theory of Queues.New York:Oxford,1962.
14 Walrand J.An introduction to queueing networks.New Jersey:Prentice Hall,1988.

·随机数学卷·

第 16 篇

库 存 论

编　者　程　侃
审校者　林元烈

目　录

引　言

库存问题是在人类的生产、经济、军事等社会活动中必然要发生的问题．普遍存在的、合理的、科学的库存管理，对于提高经济效益是十分显著的．库存论(inventory theory)就是以库存问题为研究对象，在运筹学与管理科学中一直比较活跃的一个研究领域，有着广泛的应用潜力．

库存问题很早就有人研究过．1915年哈里斯(F. Harris)第一个对商业中的库存问题进行了研究，他建立了一个简单的确定性模型，求得了现在被称为经济订货量公式(EOQ, economic order quantity)的最优解．第二次世界大战后，科学工作者对随机性、多品种、多阶段或非平稳的库存模型进行了广泛的研究．在所建的模型中已考虑到了需求的随机性、非平稳性，供货滞后的随机性，以及多阶段、多品种、多级的库存管理模式．近20多年来，由于市场变化迅速，库存问题呈现出小批量多品种等特点，要求生产/库存系统适应这种竞争的需要．计算机技术、信息技术及应用软件的飞速发展，使得库存管理进入了现代化的计算机管理时代．20世纪70年代末出现了物料需求计划(MRP, material requirement planning)，以后又进一步发展为制造资源计划(MRPⅡ, manufacturing resource planning)．MRP及MRPⅡ的宗旨是计划零部件的生产(或商品的订购)时间，以便使用最小的资源去满足需求．20世纪80年代初，由于充分认识到过量的库存会导致占用大量流动资金及支付大笔利息，因此，出现了适时生产(JIT, just in time)的概念．JIT的应用在日本的一些著名汽车制造厂(如丰田等)获得了很大的成功．

如今，库存管理是每一个生产/流通企业必须认真去做的一项日常工作，只有做好库存管理，加速资金周转，提高效益，才能增强企业的竞争力．

1　库存问题的描述

库存问题有供—存—销三个环节．供是指订货(或安排生产)；存是指到货后的库存；销是指通过部件的集成(生产装配)或直接销售来满足顾客的需求．在这样的一个系统中，决策者通过控制订货(开工生产)的时间间隔及订货量来调节系统的运行，使得在某种费用准则下系统的性能达到最优．

一个库存系统有如下的要素：

1. 需求

需求是库存系统的输出．在一定时间内的需求(销售)量可以通过对历史数据的统计处理获得，或者基于对市场销售量的调查与分析来获得．需求量可以是一个常量，如自动装配线上一个工作日对某种零件的需求量；也可以是非平稳的，如某地区一年四季生活用煤的需求量，它受季节性的影响；需求也可以是随机的，如某

种商品在一个月内的销售量.

对需求量特征的掌握是制定合理的库存计划的重要前提.

2. 补充供应

货物的不断补充供应是使库存系统能够运行下去的输入,它可以通过订货或安排生产来获得.在补充供应这一环节中,订货与到货之间的时间滞后是影响库存系统性能的一个重要因素.通常把滞后时间设定成常数或非负随机变量.理想化的简单情形是瞬时交货,它是供货或生产能力非常大时的一种近似.滞后现象使库存问题变得复杂化.

3. 缺货处理

由于需求或供货滞后时间可能具有随机性,因此,缺货是可能发生的.对于缺货,通常采取如下两种处理方式:一种是,对于未能完全满足的需求,其不足部分在订货到达后立即补上;另一种是,对于未能全部满足的需求,其不足部分"损失掉",即不再补充供应.后一种情形常发生在顾客到零售店购物时,当缺货时顾客会到别的商店去购买.

4. 盘点方式

用 $I(t)$ 记时刻 $t\geqslant 0$ 时的库存量水平.为了掌握库存量,需要对系统进行盘点.盘点方式分为两类:一类是**连续盘点**,此时对于任意 t, $I(t)$ 都已知;另一类是**周期盘点**,此时只知道 $I(kt)(k=0,1,2,\cdots)$,这里 t 是一个常数,通常称作周期.不同的盘点方式自然会影响到库存的决策.

5. 存贮策略

存贮策略给出何时补充库存,以及补充多少的一个方案.常用的有如下几种:

(1)**(s,Q)策略**　即系统连续盘点,一旦库存水平小于 s,立即发出一个订单,其订货量为常数 Q;若库存水平大于等于 s,则不订货,s 称作订货点库存水平;

(2)(s,S)策略　系统连续盘点,一旦库存水平小于 s,立即发出一个订单,其订货量使得订货时刻的库存水平达到 S;否则,就不予订货,称为**(s,S)策略**.注意,(s,S)策略中每次的订货量不一定相同;

(3)(R,s,Q)策略　系统以周期 R 进行盘点,其余行为同(s,Q)策略,称为**(R,s,Q)策略**;

(4)(R,s,S)策略　系统以周期 R 进行盘点,按盘点时的库存水平执行(s,S)策略,称为**(R,s,S)策略**.

6. 费用结构

库存系统中的费用通常包括订货(进货)费、保管(库存)费、缺货损失费,以及为控制系统运行所需的费用.

订货费通常有如下形式:

$$C_1(z)=\begin{cases}K+cz & (z>0),\\ 0 & (z=0),\end{cases}\tag{1-1}$$

其中 c 为货物单价(或单位生产费用);z 为进货量(或生产量);K 为一次进货所需之固定费用(如手续费、生产准备费、最小起运费等).注意,处理批量折扣时进货费有不同的形式.

保管费包括库存费、保险费以及保管过程中的损耗等费用.

缺货费是用来衡量因缺货而带来的损失的.缺货直接导致营业额的损失或生产的中断,间接地会造成企业信誉的下降.有的情形则会造成更严重的影响,如医院血库缺货会危及病人生命,而在战争时军需物品供应不上其后果更是不堪设想.在库存系统中,缺货损失的费用往往最难量化.

系统控制费用包括获得决策所需数据的费用,计算以及其他管理费用.不过,在目前大多数库存研究文献中这部分费用都被忽略了.

7.目标函数

目标函数是选择最优策略的准则.常见的目标函数有平均费用(或利润)及折扣费用(或利润).最优策略的选择应使费用最小或利润最大.

综上所述,若要对单个货物库存问题进行完整描述,就需要知道以上要素.决策者通过何时订货、订多少货来对系统实施控制.若采用周期盘点,则周期长度也是一个决策变量.

由于库存模型由许多要素组成,因此,不同情形的组合使得库存模型变化多端.但大体上库存模型可按如下几个方面分类:确定性库存对随机性需求;单品种货物对多品种;单阶段(周期)对多阶段;单级对多级;参数平稳的情形对随时间变化(非平稳)的情形等等.

下面将介绍库存论中的基本模型.需要指出的一点是,这里所介绍的模型只是分析问题的一个基本框架,在企业实际管理中,应将其他诸多因素与库存问题统一考虑,这样才能给出合理的切合实际的库存方案.

2 确定性库存模型

2.1 确定性库存基本模型

确定性库存基本模型有如下假定:

1° 单品种货物库存,连续盘点;

2° 瞬时供货;

3° 需求率 D 是常数;

4° 不允许缺货;

5° 采用 (s,S) 策略;

6° 费用包括订货费及保管费,订货费 $C_1(z)$ 由式(1-1)给出,保管费与一个运行周期(相邻两次订货之间的间隔)中的平均库存量成正比;

7° 目标函数为长期运行下单位时间中的最小平均费用.

那么,如何求出 (s,S),使目标函数达到最小?为此,引进如下记号:

$I(t)$——从一个运行周期开始经过时间 t 后的库存量;

T——运行周期长度;

$Q = S - s$——一次的订货量；

r——一个单位价格的货物在单位时间中的保管费.

在(s, S)策略下,这个基本模型无缺货损失费,一个运行周期中的订货费为$C_1(Q)$,保管费为$C_2(T) = cr\int_0^T I(t)\mathrm{d}t$.由假定2°和3°,且不妨假定$t = 0$是一个运行周期的起始点,即$I(0) = S$,则必有

$$I(t) = S - Dt \quad (0 \leqslant t \leqslant T), \tag{2-1}$$

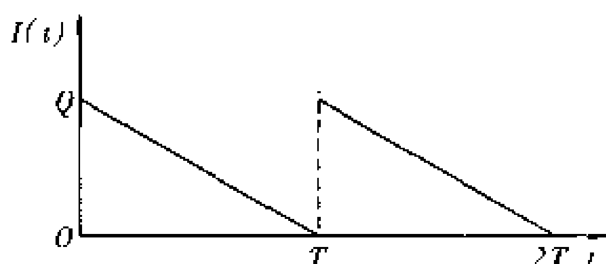


图 2-1

其图形如图2-1所示.由于瞬时供货又不允许缺货(假定2°和4°),故在(s, S)策略下必有$s = 0$.因此每次的订货量

$$Q = S, \quad I(T) = 0. \tag{2-2}$$

由式(2-1)和式(2-2),可得

$$Q = S = DT. \tag{2-3}$$

故单位时间中的平均库存量为

$$\frac{1}{T}\int_0^T I(t)\mathrm{d}t = \frac{1}{2}Q. \tag{2-4}$$

目标函数为一个周期中的平均费用

$$\frac{1}{T}\left\{C_1(Q) + cr\int_0^T I(t)\mathrm{d}t\right\} = \frac{1}{T}(K + cQ) + \frac{1}{2}crQ,$$

于是目标函数可表为Q的函数,即目标函数

$$F(Q) = cD + \frac{DK}{Q} + \frac{1}{2}crQ. \tag{2-5}$$

由此可求得最优解

$$Q^* = \sqrt{\frac{2DK}{cr}}. \tag{2-6}$$

相应的最小平均费用为

$$F(Q^*) = cD + \sqrt{2crDK}. \tag{2-7}$$

式(2-6)就是经典的**EOQ(经济订货量)公式.**

EOQ公式在实际中常被采用,其原因除公式简单外,还由于其稳健性好,即当订货量Q偏离最优订货量Q^*时,其费用的相对变化不大.稳健性概念可描述如下.

由于目标函数表达式(2-5)中的cD与订货量Q无关,因此只需考虑如下的费

用：

$$G(Q)=\frac{DK}{Q}+\frac{1}{2}crQ. \tag{2-8}$$

使上式达最小的解 Q^* 仍由(2-6)式给出，对应的最小平均费用为

$$G(Q^*)=\sqrt{2crDK}. \tag{2-9}$$

若记 $Q'=(1+\delta)Q$，用 δ 表示偏离订货量 Q 的大小，记 $\alpha(\delta)$ 为偏离最佳订货量时费用的相对误差，则

$$\alpha(\delta)=\left.\frac{G(Q')-G(Q)}{G(Q)}\right|_{Q=Q^*}=\frac{\frac{DK}{Q^*(1+\delta)}+\frac{1}{2}cr(1+\delta)Q^*}{\sqrt{2crDK}}-1$$

$$=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{1+\delta}+1+\delta\right)-1<\frac{1}{2}\delta^2. \tag{2-10}$$

量 $\alpha(\delta)$ 反映了偏离最佳订货量时造成平均费用增加的百分比，它反映了平均费用对最佳订货量的敏感性.

例 1 设生产线年需求某种元件 8 000 个，单价 $c=0.4$ 元/个，每次的固定订货费 $K=5.2$ 元，年存贮费用率 $r=0.36$/年，求最佳订货量.

解 由 EOQ 公式(2-6)，得

$$Q^*=\sqrt{\frac{2\times 8\,000\times 5.2}{0.4\times 0.36}}\text{个}=760\text{个}.$$

因此，

$$\text{年订货次数}=8\,000/760\text{次}=10.5\text{次},$$

即每隔 35 天订货一次. 相应的最佳平均费用为

$$G(Q^*)=\sqrt{2\times 0.4\times 0.36\times 8\,000\times 5.2}\text{元}=109.5\text{元}.$$

现若每次订货量为 1 000 个，即

$$\delta=\frac{Q'-Q}{Q}=\frac{Q'-Q^*}{Q^*}=0.316,$$

此时有

$$\alpha(\delta)=0.038.$$

由式(2-10)知，相应的费用为最佳费用的 1.038 倍. 这表明相应订货量的变化并不引起有关费用很大的增长. 这种稳健性正是实际问题需要的.

2.2 供货滞后时间固定的模型

供货滞后时间固定的模型只是把 2.1 节中基本模型的假定 2° 改成：

2°′ 供货滞后时间为常数 l.

此时最佳订货量 Q^* 的公式不变，但由于有固定的供货滞后，订货点的库存水平应为 $s^*=Dl$.

2.3 缺货事后补足的模型

缺货事后补足的模型只是把基本模型中的假定4°改为：

4°′ 允许缺货，缺货事后补足.

这里仍记 T 为一个运行周期，并且不妨设它从 $t=0$ 开始. 记 $x_+=\max(0,x)$，并引进如下记号.

$I(t)$——时刻 t 的库存水平，$0\leqslant t<T$. 注意，若时刻 t 缺货，则有 $I(t)<0$.

$H(t)$——时刻 t 手头有的库存量，即 $H(t)=I(t)_+$.

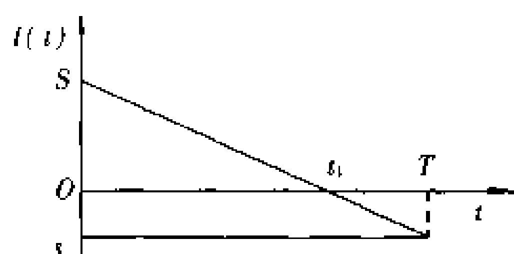


图 2-2

$B(t)=(-I(t))_+$——时刻 t 的缺货量.

p——一个单位价格的货物缺货单位时间的费用.

这个库存模型在一个周期中库存量的变化如图2-2所示，其中 t_1 是使库存水平为0的时刻，即有 $I(t_1)=0$.

注意到库存水平 $I(t)$ 仍有式(2-1)这种形式，因此一个周期中总的库存量及缺货量分别为

$$\int_0^T I(t)_+\,\mathrm{d}t=\int_0^{t_1} I(t)\mathrm{d}t=St_1-\frac{1}{2}Dt_1^2,$$

$$\int_0^T B(t)\mathrm{d}t=-\int_{t_1}^T I(t)\mathrm{d}t=\frac{1}{2}D(T^2-t_1^2)-S(T-t_1).$$

再注意到一个周期中的订货费为 $K+cQ$，即可得单位时间中的平均总费用

$$C_\Sigma=\frac{1}{T}\left\{cr\int_0^T I(t)_+\,\mathrm{d}t+cp\int_0^T B(t)\mathrm{d}t+K+cQ\right\}. \tag{2-11}$$

将条件 $S=s+Q=Dt_1$ 及 $Q=DT$，代回式(2-11)，消去 t_1,T，经过简化可得以 Q，S 为变量的目标函数

$$F(S,Q)=cD+\frac{1}{2Q}[2DK+crS^2+cp(S-Q)^2]\qquad (S,Q>0). \tag{2-12}$$

容易验证其黑塞(Hessian)矩阵

$$\begin{bmatrix}\dfrac{\partial^2 F}{\partial Q^2} & \dfrac{\partial^2 F}{\partial Q\partial S}\\[2mm] \dfrac{\partial^2 F}{\partial Q\partial S} & \dfrac{\partial^2 F}{\partial S^2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}[2DK+c(r+p)S^2]Q^{-3} & -c(r+p)SQ^{-2}\\ -c(r+p)SQ^{-2} & c(r+p)Q^{-1}\end{bmatrix}$$

是一个正定矩阵. 因此，$F(Q,S)$ 是 $S,Q>0$ 上的严格凸函数，故有唯一的最小值. 此最小值可由

$$\frac{\partial F}{\partial Q}=0,\quad \frac{\partial F}{\partial S}=0$$

解出. 其解为

$$Q^* = \sqrt{\frac{2DK}{cr}}\sqrt{1 + \frac{r}{p}}, \tag{2-13}$$

$$S^* = \sqrt{\frac{2DK}{cr}}\sqrt{\frac{p}{r + p}}, \tag{2-14}$$

$$s^* = S^* - Q^* = -\sqrt{\frac{2rDK}{cp(r + p)}}. \tag{2-15}$$

值得注意的是：

(1) 若 $p = \infty$，即不允许缺货，则此时式(2-13)化归为 EOQ 公式(2-6)；

(2) 在实际的库存问题中，缺货损失的费用率很难估计. 为此可从管理的角度来考虑. 假定决策者要求库存不能满足需求的时间比例要小于 α，$0 < \alpha < 1$，由于本模型中缺货的时间比例为 $1 - t_1/T$，故可令 $\alpha = 1 - t_1/T$. 因此

$$\alpha = 1 - \frac{S^*}{Q^*} = \frac{r}{r + p}.$$

于是可以反解出

$$p = r(\frac{1}{\alpha} - 1).$$

这对应用是方便的.

2.4 允许缺货且供货能力有限的模型

允许缺货且供货能力有限的模型 1 只是把基本模型的假定 4° 改成缺货事后补足模型的 4°′(见 2.3 节)，以及将基本模型的假定 2° 改为：

2°″ 单位时间供货率为 R，$R > D$.

模型在一个运行周期中的库存变化如图 2-3 所示. 在一个运行周期 $(0, T)$ 中，初始时刻库存水平 S，在 $(0, t_1)$ 中以需求率 D 的速率减少；在 (t_1, T) 中进货(或生产)与需求同时存在. 因此库存量以速率 $R - D$ 增加. 下面用简单的几何论证把它化为 2.3 节中研究过的模型.

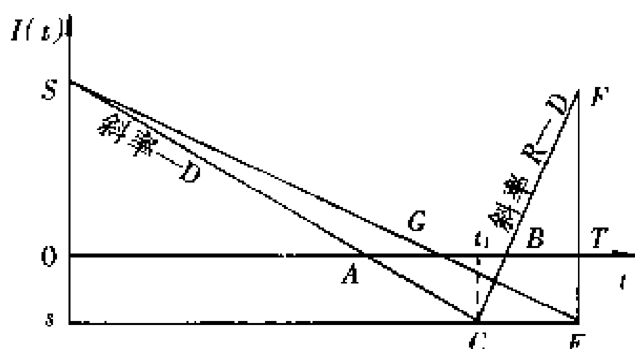


图 2-3

如图 2-3 所示，在一个周期中，保管费与 $\triangle AOS$，$\triangle BTF$ 的面积之和成正比，缺货损失与 $\triangle ABC$ 的面积成正比. 连 SE，交 $0T$ 于 G. 由相似三角形对应边成比例可得：

$$\frac{AG}{CE} = \frac{SA}{SC} = \frac{0S}{sS} = \frac{TF}{EF} = \frac{BT}{CE}.$$

因此，

$$AG = BT.$$

于是有如下面积关系：

$$S_{\triangle ABC} = S_{\triangle CTE}, \quad S_{\triangle AOS} + S_{\triangle BFT} = S_{\triangle COS}.$$

因而图2-3中的一个周期对应于2.3节中的一个周期.相应的需求率 D_1 是 SE 斜率的绝对值.仍记 $Q = S - s$.注意,本模型与基本模型不同的是,Q 不再是一个运行周期的订货量,$D_1 = Q/T$;而 SC,CF 的斜率的绝对值分别为

$$D = \frac{Q}{t_1}, \quad R - D = \frac{Q}{T - t_1},$$

由此得

$$T = \frac{Q}{D} + \frac{Q}{R - D},$$

故有

$$D_1 = \frac{D(R - D)}{R}.$$

把式(2-13) ~ 式(2-15)中的 D 换成 D_1,即得本模型中的最佳方案:

$$Q^* = a\sqrt{\frac{2DK}{cr}}\sqrt{1 + \frac{r}{p}},$$

$$S^* = a\sqrt{\frac{2DK}{cr}}\sqrt{\frac{p}{r + p}},$$

$$s^* = -a\sqrt{\frac{2rDK}{cp(r + p)}},$$

其中 $a = \sqrt{1 - D/R}$. s^* 即为一个周期中的最大缺货量.进一步可得最佳订货周期长度

$$T^* = \frac{Q^*}{D_1} = \sqrt{\frac{2KR}{crD(R - D)}}\sqrt{1 + \frac{r}{p}},$$

在这一周期中开始生产(或进货)的最佳时刻为

$$t_1^* = \frac{Q^*}{D} = a\sqrt{\frac{2K}{crD}}\sqrt{1 + \frac{r}{p}},$$

生产持续的时间长度为

$$T^* - t_1^* = \frac{Q^*}{R - D}.$$

一个周期的订货量为

$$R(T^* - t_1^*) = Q^* + D(T^* - t_1^*).$$

其中有如下特例需要注意.

(1) 若 $p = \infty$,则模型为不允许缺货,供货能力有限的模型.具体结果为

$$s^* = 0, \quad S^* = Q^* = a\sqrt{\frac{2DK}{cr}}.$$

(2) 若 $R = \infty$,则模型为允许缺货,但供货能力无穷大(即瞬时供货)的模型.其中 Q^*,S^* 及 s^* 的公式同式(2-13) ~ 式(2-15),与2.3节中缺货事后补足的模型一致.

2.5 有常数损耗率的库存模型

许多库存物品会有损耗.这里讨论最简单的有常数损耗率的模型.在这个模型中,除有基本模型的假定外,还设定:

8° 存货有常数损耗率 μ_h.

用 $I(t)$ 记订货后时刻 t 的未损耗的库存水平,$0 \leqslant t < T$.从 t 到 $t+\mathrm{d}t$,库存水平的变化为

$$I(t+\mathrm{d}t) = I(t) - \mu_h I(t)\mathrm{d}t - D\mathrm{d}t.$$

于是其微分方程为

$$I'(t) = -\mu_h I(t) - D \qquad (0 \leqslant t < T),$$
$$I(0) = S = s + Q.$$

其解为

$$I(t) = -\frac{D}{\mu_h} + (s + Q + \frac{D}{\mu_h})\exp(-\mu_h t) \qquad (0 \leqslant t < T). \qquad (2\text{-}16)$$

由于 $I(T) = s$,故由上式,得

$$Q = (s + \frac{D}{\mu_h})(\exp(\mu_h T) - 1). \qquad (2\text{-}17)$$

目标函数为单位时间中的平均费用

$$\frac{1}{T}\left(K + cQ + cr\int_0^T I(t)\mathrm{d}t\right).$$

利用式(2-16)及式(2-17),上述目标函数可表为 s, T 的函数

$$F(s,T) = \frac{K}{T} - \frac{crD}{\mu_h} + \frac{c}{T}(1 + \frac{r}{\mu_h})(s + \frac{D}{\mu_h})(e^{\mu_h T} - 1).$$

其最小值在 $s^* = 0$ 及由

$$\frac{\partial F}{\partial T} = 0$$

解出的 T^* 上达到,即 T^* 应满足方程

$$\frac{K}{T} + \frac{c}{T}(1 + \frac{r}{\mu_h})\frac{D}{\mu_h}(\exp(\mu_h T) - 1) = cD(1 + \frac{r}{\mu_h})\exp(\mu_h T),$$

或满足方程

$$\mu T - 1 = a\exp(-(\mu_h T - 1)), \qquad (2\text{-}18)$$

其中

$$a = \left(\frac{K\mu_h}{cD(1 + \frac{r}{\mu_h})} - 1\right)\exp(-1).$$

若记 $x = \mu T - 1$,则式(2-18)变为

$$x = a\exp(-x). \qquad (2\text{-}19)$$

不难证明,若 $a \geqslant 0$,则上式有唯一解 x^*,$0 \leqslant x^* < \infty$;若 $a < 0$,则在 $-1 < x < 0$

中有唯一解 x^*. 因此,总有

$$T^* = \frac{1}{\mu_h}(1 + x^*) > 0.$$

由此得

$$s^* = 0, \quad Q^* = S^* = \frac{D}{\mu_h}(e^{\mu_h T^*} - 1) = \frac{D}{\mu_h}\left(\frac{ae}{x_1^*} - 1\right). \qquad (2\text{-}20)$$

注意:令 $\mu_h \to 0$,即得库存无损耗的模型. 此时由上式得 $Q^* = S^* = DT^*$. 而 T^* 满足的方程式(2-18) 变为

$$\frac{T^2}{2} = \frac{K}{crD}.$$

解之,有 $T^* = \sqrt{2K/(crD)}$,与基本模型一致.

例 2　设损耗率 $\mu_h = 0.02$,其余数据同例 1. 由于存贮过程中有损耗,故年需求量变为

$$D = \frac{8\,000}{0.98}\text{个} = 8\,164\text{个},$$

这样才能保证有 8 000 个好的元件. 将其代入各式,容易算出

$$a = -0.367\,9, \quad T^* = 0.091\,5\text{年}.$$

上述 T^* 是由式(2-19) 用数值方法求得的. 相应的一次订货量由式(2-20) 得

$$Q^* = 748\text{个}.$$

每年的订货次数为
$$\frac{1}{T^*} = 10.9\text{次}.$$

如果损耗率变为 $\mu_h = 0.04$,则年需求量变为

$$D = \frac{8\,000}{0.96}\text{个} = 8\,334\text{个},$$

相应的 a 的值不变,而

$$T^* = 0.088\,2\text{年}, \quad Q^* = 756\text{个},$$

每年的订货次数为

$$\frac{1}{T^*} = 11.3\text{次}.$$

2.6　有通货膨胀的基本库存模型

当不考虑货币的时间价值及通货膨胀时,库存控制问题在各个运行周期中的情形相同. 因而长期运行下的平均费用与一个周期中的平均费用相同,其优化问题在一个周期中考虑即可. 但是,如果引入利率与通货膨胀率,则目标函数就不再是长期运行的平均费用,而应代之以折扣费用. 因此,本模型要把基本模型中的假定 7° 换成:

7′ 目标函数为折扣总费用,并设连续时间的利率为 α,通货膨胀率为 i.

费用只考虑采购费及保管费,其余假定不变.

这时相邻订货间隔为

$$T = \frac{Q}{D},$$

其中 Q 为订货量；D 为需求率. 考虑到货币的时间价值及通货膨胀，可得总费用的现值为

$$\begin{aligned} F(Q) &= K + cQ + \frac{1}{2}crQ + \left(K + cQ + \frac{1}{2}crQ\right)\exp\left((i-\alpha)\frac{Q}{D}\right) + \cdots \\ &= \left(K + cQ + \frac{1}{2}crQ\right)\left(1 - \exp\left(-(\alpha - i)\frac{Q}{D}\right)\right)^{-1}. \end{aligned}$$

上式只有在 $i < \alpha$ 时才成立. 为求 $F(Q)$ 的最小值只需解 $\mathrm{d}F/\mathrm{d}Q = 0$，化简后可得

$$\exp\left((\alpha - i)\frac{Q}{D}\right) = \left(\frac{K}{c\left(1 + \frac{1}{2}r\right)} + Q\right)\frac{\alpha - i}{D} + 1.$$

若记

$$x = (\alpha - i)\frac{Q}{D}, \quad a = 1 + \frac{K}{c\left(1 + \frac{r}{2}\right)}\frac{\alpha - i}{D},$$

则有 x 应满足的方程为

$$\mathrm{e}^x = a + x. \tag{2-21}$$

显然，式(2-21) 必存在唯一解 $x^* > 0$. 因此 $Q^* = \frac{D}{\alpha - i}x^*$.

由于在一般情形下有 $0 < (\alpha - i)Q/D = x^* \ll 1$，故式(2-21) 中的 x 可以近似地由下式解出：

$$1 + x + \frac{1}{2}x^2 = a + x.$$

即有

$$x = \sqrt{2(a-1)} = \sqrt{\frac{2K(\alpha - i)}{cD(1 + r/2)}}.$$

故

$$Q^* \approx \frac{\sqrt{\frac{2DK}{\alpha c\left(1 + \frac{r}{2}\right)}}}{\sqrt{1 - \frac{i}{\alpha}}}. \tag{2-22}$$

若不考虑通货膨胀，即取 $i = 0$，则式(2-22) 变为

$$Q^* \approx \sqrt{\frac{2DK}{\alpha c\left(1 + \frac{r}{2}\right)}}.$$

例 3 假定通货膨胀率 $i = 0.04$，利率 $\alpha = 0.06$，其余数据同例 1，则式(2-21) 中的 $a = 1.000\,027\,6$，相应的解 $x = 0.007\,42$，

$$Q^* = 2\,966 \text{ 个}, \quad T^* = 0.37 \text{ 年}.$$

若利用近似公式(2-22),则有

$$Q_1^* = 2\,969\ 个, \quad T_1^* = 0.37\ 年.$$

与精确解相差很小.

与不考虑通货膨胀的基本模型比较(例 1),订货量有较大的区别.

2.7　批量折扣库存模型

下面讨论在大量采购时单价有批量折扣的库存模型. 通常可设货物的单价 $v(z)$ 是采购量 z 的递减阶梯函数. 本模型的其他假定同 2.1 节的基本模型. 为简单起见,这里只考虑二段单价的情形,即单价为

$$v(z) = \begin{cases} c_1 & (0 < z < Q_b), \\ c_2 & (Q_b \leqslant z), \end{cases} \quad (c_1 > c_2) \tag{2-23}$$

的情形,其中 Q_b 为实行折扣的批量.

与基本模型的推导相仿,由于不允许缺货,故单位时间中的平均总费用为

$$F(Q) = \begin{cases} c_1 D + \dfrac{DK}{Q} + \dfrac{1}{2} c_1 r Q & (0 < Q < Q_b), \\ c_2 D + \dfrac{DK}{Q} + \dfrac{1}{2} c_2 r D & (Q_b \leqslant Q). \end{cases}$$

观察 $F(Q)$ 的图形(图 2-4)可知,使其达最小值的点,即最佳订货量 Q^* 与 Q_b 的位置只有图 2-4(a),(b),(c) 所示的三种可能情形.

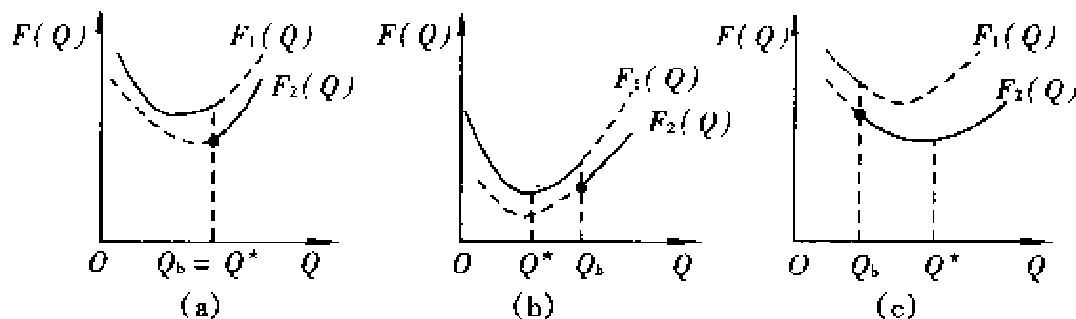


图 2-4

由此可得求最佳订货量 Q^* 的步骤如下.

(1) 计算有批量折扣时的 EOQ,

$$Q_2 = \sqrt{2DK/(c_2 r)}.$$

(2) 若 $Q_2 \geqslant Q_b$(图 2-4(c)),则 $Q^* = Q_2$;否则可算出

$$Q_1 = \sqrt{2DK/(c_1 r)}.$$

(3) 计算 $F(Q_b)$ 及 $F_1(Q_1)$,

$$F_1(Q_1) = c_1 D + \sqrt{2 c_1 r D K}.$$

若 $F(Q_b) \leqslant F_1(Q_1)$(图 2-4(a)),则 $Q^* = Q_b$;否则 $Q^* = Q_1$(图 2-4(b)).

用相仿的步骤可以推广到多种折扣价格的情形.

例 4　一种货物的基本数据如表 2-1 所示.

表 2-1

	D/(件/年)	c_1/(元/件)	K/元	r/年$^{-1}$
1	4 800	15	20	0.25
2	1 200	3.5	20	0.25
3	50 000	3.8	20	0.25

供应商答应订货量超过 1 000 件时单价优惠 5%,即 $c_2 = 0.95c_1$. 试分别求其最佳订货量.

解 对于货物 1: $Q_2 = 233$ 件 $<$ 1 000 件, $Q_1 = 227$ 件. $F(Q_b) = 70\ 278$ 元, $F_1(Q_1) = 72\ 849$ 元 $> F(Q_b)$, 故 $Q^* = 1\ 000$ 件.

对于货物 2: $Q_2 = 241$ 件 $<$ 1 000 件, $Q_1 = 235$ 件. $F(Q_b) = 4\ 430$ 元, $F_1(Q_1) = 4\ 405$ 元 $< F(Q_b)$, 故 $Q^* = 235$ 件.

对于货物 3: $Q_2 = 1\ 489$ 件 $>$ 1 000 件, 故 $Q^* = 1\ 489$ 件.

2.8 一类特殊库存模型

下面介绍实用中常见的一类库存问题. 假定在第一次采购时可以用较低的价格来进货,例如,在成套设备引进的同时,其易损零部件的进口,或者是涨价前的最后一次低价的订货机会等. 那么,第一次订货量多大才合适?第二次什么时候开始订货,订货量多大?模型的其余假定同 2.1 节的基本模型.

若当前的单价为 c_1,而单价即将为 $c_2(c_1 < c_2)$,记首次订货量为 Q,则它可以供应 Q/D 个时间单位. 由式(2-4),这一阶段中的平均库存量为 $Q/2$. 因此,在 Q/D 时间中的总费用为

$$G(Q) = K + c_1Q + c_1r\frac{Q}{2}\frac{Q}{D} = K + c_1Q + \frac{c_1r}{2D}Q^2.$$

在 c_2 价格下的经济订货量为

$$Q_2 = \sqrt{\frac{2DK}{c_2r}},$$

相应的单位时间平均费用由式(2-7)给出,即

$$F(Q_2) = c_2D + \sqrt{2c_2rDK},$$

因而在 Q/D 时间内采用经济订货量公式的最优解 Q_2 总费用为

$$\frac{Q}{D}F(Q_2) = \left(c_2 + \sqrt{\frac{2c_2rK}{D}}\right)Q.$$

于是,可以考虑选择 Q,使

$$H(Q) = \frac{Q}{D}F(Q_2) - G(Q) \tag{2-24}$$

达到极大,即使第二次订货与第一次订货的费用差额最大. 由 $H'(Q) = 0$,即可解

得首次最佳订货量

$$Q_{op}=\frac{c_2}{c_1}Q_2+\frac{c_2-c_1}{c_1}\frac{D}{r}.$$

而其后的订货则可按单价为 c_2 时的 EOQ 公式进行.

例 5 设 $c_1=25$ 元/件, $c_2=35$ 元/件, $D=480$ 件/年, $k=20$ 元, $r=0.4$/年, 求首次最佳订货量.

解

$$Q_2=\sqrt{\frac{2DK}{c_2r}}\approx 38\text{件},\quad F(Q_2)=17\,318.5\text{元},$$

$$Q_{op}=\left(\frac{35}{25}\times 38+\frac{35-25}{25}\times\frac{480}{0.4}\right)\text{件}=534\text{件},$$

于是,首次订货534件,经过534/480年 = 1.1年后,进行第二次订货,每次订38件.以后每隔4周订货一次.容易算出 $H(Q_2)=386.0$ 元, $H(Q_{op})=2\,926.4$ 元.因此,用这种方式订货可节省 $H(Q_{op})-H(Q_2)=2\,540.4$ 元.

本节讨论的模型还可以推广到有 n 种货物,并且对第一次订货有总预算 W 的约束的情形.沿用相仿的记号,此时问题归为求

$$\max l(Q_1,Q_2,\cdots,Q_n)$$

下的 $Q_i(i=1,2,\cdots,)$,约束为

$$\sum_{i=1}^{n}c_iQ_i\leqslant W,$$

其中

$$l(Q_1,Q_2,\cdots,Q_n)=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{Q_i}{D_i}(c_{2i}D_i+\sqrt{2c_{2i}rD_iK_i})-(K_i+c_{1i}Q_i+\frac{c_{1i}r}{2D_i}Q_i^2)\right).$$

不考虑约束条件求出第 i 种货物的第一次订货量 Q_i^*,

$$Q_i^*=\frac{c_{2i}}{c_{1i}}Q_{2i}+\frac{c_{2i}-c_{1i}}{c_{1i}}\frac{D_i}{r}\qquad(i=1,2,\cdots,n),\tag{2-25}$$

其中 Q_{2i} 为第 i 种货物单价为 c_{2i} 时的 EOQ 公式的最优解.此时若约束条件 $\sum_{i=1}^{n}c_{1i}Q_i^*\leqslant W$ 满足,则第一次订货量就采用上述公式;否则由如下的拉格朗日(Lagrange)乘子法求解.令

$$L(Q_1,Q_2,\cdots,Q_n,\lambda)=l(Q_1,Q_2,\cdots,Q_n)-\lambda\left(\sum_{i=1}^{n}c_{1i}Q_i-W\right).$$

由此得

$$\frac{\partial L}{\partial\lambda}=0,\quad\frac{\partial L}{\partial Q_i}=0\quad(i=1,2,\cdots,n).\tag{2-26}$$

解之有第 i 类货物的首次最佳订货量

$$Q_i^*=\frac{c_{2i}}{c_{1i}}\left(Q_{2i}+\frac{D_i}{r}\right)-\frac{D_i}{\sum_{i=1}^{n}c_{1i}D_i}\left(\sum_{i=1}^{n}c_{2i}\left(Q_{2i}+\frac{D_i}{r}\right)-W\right).\tag{2-27}$$

例 6 设有三种货物,其本数据如表 2-2 所示. 总预算约束 $W = 10\,000$ 元. 试讨论其订货策略.

表 2-2

货物	c_1/(元/件)	c_2/(元/件)	D/(件/年)	K/元	r/(件·年)$^{-1}$
1	15	20	800	20	1
2	20	30	500	20	1
3	10	20	400	20	1

先算出第 i 种货物在单价为 c_{2i} 时的 EOQ:

$$Q_{21} = \sqrt{\frac{2 \times 800 \times 20}{20 \times 1}} 件 = 40 件, \quad Q_{22} = 26 件, \quad Q_{23} = 29 件.$$

不考虑预算约束时货物 1 的第一次订货量为

$$Q_1^* = \left(\frac{20}{15} \times 40 + \frac{20 - 15}{15} \times \frac{800}{1}\right) 件 = 320 件.$$

相仿, $Q_2^* = 289$ 件. 此时这两种货物的费用为

$$(320 \times 15 + 289 \times 20) 元 = 10\,580 元 > W.$$

故利用式(2-27)可以求出满足约束条件的最佳订货量. 它们分别为:

$$\begin{aligned} Q_1^* &= \frac{20}{15}(40 + 800) - \frac{800}{26\,000}(20 \times 840 + 30 \times 526 + 20 \times 429 - 10\,000) 件 \\ &= 161 件, \end{aligned}$$

$$Q_2^* = 189 件, \quad Q_3^* = 378 件.$$

3 需求非平稳的有限阶段确定性模型

本章讨论需求已知但非平稳,且在有限阶段中运行的确定性库存模型. 非平稳的需求量是可能发生的. 例如,按照签订的合同,每阶段有不同的供货要求;对货物的需求受季节性影响;预防件更换对零部件的需求可能是非平稳的,等等. 因此,这种推广是有意义的.

3.1 连续盘点模型

连续盘点模型有如下假定.

1° 单品种货物库存,连续盘点.

2° 瞬时供货.

3° 需求 $d(t)$ 是 t 的函数, $0 \leqslant t < T$.

4° 不允许缺货.

5° 库存系统在有限时段 $[0, T)$ 中运行.

6° 在$[0,T)$中发出n个订货单，$n=1,2,\cdots$；第$i+1$个订单发出的时间为t_i，$i=0,1,2,\cdots,n-1,0=t_0<t_1<\cdots<t_{n-1}<t_n=T$；第$i$次的订货量为$Q_i$，$i=1,2,\cdots,n$.

初始库存为0，因此在$t=0$时发出第一个订单，订货量为Q_1.

7° 费用包括订货费及保管费. 订货费$C_1(z)$由式(1-1)给出. 保管费与库存水平成比例. 货物的单价为c，单位时间单位成本的保管费为r.

那么，如何确定n及一对序列$\{(Q_i,t_{i-1}),i=1,2,\cdots,n\}$，使得库存系统在$[0,T)$时段中总费用最小？

记$D(t)$为到时刻t的累积需求量，即

$$D(t)=\int_0^t d(x)\mathrm{d}x \qquad (0\leqslant t\leqslant T). \tag{3-1}$$

首先注意到在时刻T，库存水平应为0；其次，由于交货是瞬时交货，因此在库存水平变为0时再订货更为经济，由Q_i,t_i的定义，有

$$Q_i=D(t_i)-D(t_{i-1}) \qquad (i=1,2,\cdots,n), \tag{3-2}$$

这表明序列t_i与Q_i互相唯一确定. 记$p(t)$为到时刻t累积的订货量. 由于订货只发生在t_i时刻，因此$p(t)$是一个阶梯函数，

$$p(t)=\sum_{i=1}^{n}D(t_i)I_i(t), \tag{3-3}$$

其中$I_i(t)$为$[t_{i-1},t_i)$上的示性函数.

在时间段$[0,T)$中的总订货费C_1及保管费C_2分别为

$$C_1=\sum_{i=1}^{n}(K+cQ_i)=nK+cD(T),$$

$$C_2=cr\int_0^T[p(t)-D(t)]\mathrm{d}t.$$

因此，在$[0,T)$中库存系统的总费用为

$$(\mathrm{TC})_n=nK+cD(T)+cr\int_0^T[p(t)-D(t)]\mathrm{d}t. \tag{3-4}$$

对于固定的订货次数n，要使式(3-4)达最小，只要使表达式中的积分达最小.

利用式(3-1)及式(3-3)，得

$$\begin{aligned}\int_0^T[p(t)-D(t)]\mathrm{d}t&=\sum_{i=1}^{n}D(t_i)(t_i-t_{i-1})+\int_0^T(T-x)d(x)\mathrm{d}x\\&=-\sum_{i=1}^{n-1}Q_{i+1}t_i+\int_0^T xd(x)\mathrm{d}x.\end{aligned} \tag{3-5}$$

由上式知，只要选取$t_1,t_2,\cdots,t_{n-1}$，使

$$F(t_1,t_2,\cdots,t_{n-1})=\sum_{i=1}^{n-1}Q_{i+1}t_i$$

达极大即可. 由式(3-2)，上式可以写成

$$F(t_1,t_2,\cdots,t_{n-1})=\sum_{i=1}^{n-1}[D(t_{i+1})-D(t_i)]t_i.$$

由极值必要条件$\frac{\partial F}{\partial t_i}=0, i=1,2,\cdots,n-1$,可以列出 $n-1$ 个方程

$$D(t_{i+1})-D(t_i)=d(t_i)(t_i-t_{i-1}) \qquad (i=1,2,\cdots,n-1). \tag{3-6}$$

因此,对于给定的 n,可以由式(3-6)解出 $n-1$ 个值 $t_1,t_2,\cdots,t_{n-1}$. 然后利用式(3-2)求出 $Q_i, i=1,2,\cdots,n$. 最后,由式(3-4)算出有 n 次订货时的总费用$(\mathrm{TC})_n$. 比较不同的 n 的值,从中选出最优的 n 及相应的t_i值$(i=1,2,\cdots,n-1)$. 下面用例子来说明这个过程.

例 1 设需求率 $d(t)=D, 0\leqslant t<T$. 此时模型变为在有限阶段$[0,T)$中的基本库存模型. 显然

$$D(t)=Dt \qquad (0\leqslant t<T),$$

方程式(3-6)变为

$$D(t_{i+1}-t_i)=D(t_i-t_{i-1}) \qquad (i=1,2,\cdots,n-1). \tag{3-7}$$

因此,可以递推地求出解

$$t_i=\frac{i}{n}T \qquad (i=1,2,\cdots,n-1). \tag{3-8}$$

这表明在需求率为常数的情况下,等间隔地订货是最优的. 由式(3-2),相应的订货量为

$$Q_i=\frac{D}{n}T.$$

由式(3-4),库存系统的总费用为(写成 n 的函数 $G(n)$)

$$\begin{aligned}G(n)&=nk+cDT+cr\left(-\sum_{i=1}^{n-1}\frac{D}{n}T\frac{i}{n}T+\int_0^T Dx\mathrm{d}x\right)\\&=nK+cDT+\frac{1}{2n}crDT^2.\end{aligned} \tag{3-9}$$

最优的 n^* 是使 $G(n)$ 达最小值,即 n^* 满足

$$G(n^*)\leqslant G(n^*-1), \quad G(n^*)\leqslant G(n^*+1).$$

利用式(3-9),上述两式可以写成

$$n^*(n^*-1)\leqslant\frac{1}{2K}crDT^2\leqslant n^*(n^*+1). \tag{3-10}$$

由此可以唯一确定 n^*,再由式(3-8)求出订货时刻.

例 2 假定 $T=6, c=3, r=1, K=10$,

$$d(t)=t \qquad (0\leqslant t<6).$$

试求库存系统的最优策略.

解 由式(3-6)可知,订货时刻 t_i 满足一组二阶常系数差分方程

$$t_{i+1}^2-3t_i^2+2t_it_{i-1}=0 \qquad (i=1,2,\cdots,n-1), \tag{3-11}$$

$$t_0=0, \quad t_n=T. \tag{3-12}$$

差分方程式(3-11)相应的特征方程为

$$x^2-3x+2=0,$$

它有两个相异的实根 1 及 2. 故式(3-11)的通解为

$$t_i = A + Bz^i \qquad (i = 0,1,2,\cdots).$$

由边界条件式(3-12),可得

$$A = -\frac{T}{2^n - 1}, \quad B = \frac{T}{2^n - 1}.$$

故有

$$t_i = \frac{T}{2^n - 1}(2^i - 1) \qquad (i = 0,1,2,\cdots,n). \tag{3-13}$$

对于取定的 n,由式(3-4)知,库存系统的总费用为

$$(\mathrm{TC})_n = nK + \frac{1}{2}cT^2 + cr\left(\int_0^T x^2 \mathrm{d}x - \sum_{i=1}^{n-1} Q_{i+1} t_i\right).$$

若记

$$G(n) = nK - cr\sum_{i=1}^{n-1} Q_{i+1} t_i$$

$$= nK - \frac{1}{2}cr\sum_{i=1}^{n-1} t_i(t_{i+1}^2 - t_i^2),$$

则最佳的 n 使 $G(n)$ 达最小值.将有关数据代入上式,则有

$$G(1) = 10, \quad G(2) = -76, \quad G(3) = -61.$$

故取 $n^* = 2$.此时由式(3-13)及式(3-2)可知,第一次订货在 $t = 0$ 时,订货量 $Q_1 = 2$,第二次订货在 $t = 2$ 时,订货量 $Q_2 = 16$.

3.2 周期盘点模型

周期盘点的库存模型有如下假定:

1° 单品种货物,周期盘点,初始库存为0.

2° 库存系统在 T 个有限时段(周期)中运行.

3° 需求 $\{d(t), t = 1,2,\cdots,T\}$ 已知.

4° 不允许缺货.

5° 瞬时供货.在每个周期开始的时刻订货并立即得到补充.在第 t 个周期开始时刻的订货量为 $p(t) \geqslant 0$ $(t = 1,2,\cdots,T)$.

6° 费用包括订货费及保管费.第 t 个周期中的订货费为 $C_1(p(t))$,这里 $C_1(z)$ 由式(1-1)定义.记 $I(t)$ 为第 t 个周期结束时的库存量,在周期 t 中的保管费定义为

$$C_2(t) = crI(t) \qquad (t = 1,2,\cdots,T).$$

那么,如何求一串非负订货量 $\{p(t), t = 1,2,\cdots,T\}$,使在有限时段 T 中的总费用最小?使总费用最小的订货量序列称为一个最优方案.

3.2.1 动态规划算法

在所讨论的库存模型中,库存量 $I(t)$ 满足如下关系式:

$$I(t) = I(t-1) + p(t) - d(t) \quad (t = 1,2,\cdots,T). \tag{3-14}$$

$$I(0)=0. \tag{3-15}$$

库存量的变化如图 3-1 所示.

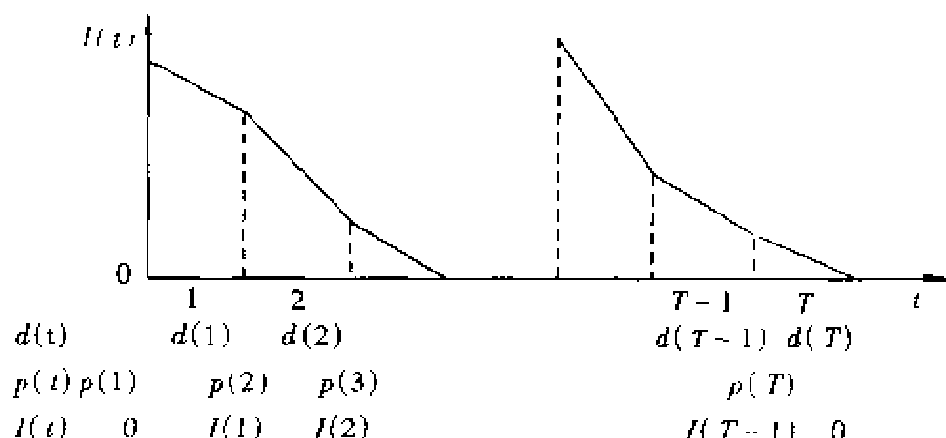


图 3-1

对于任一最优方案 $\{p(t),t=1,2,\cdots,T\}$,必有

$$I(t-1)p(t)=0 \qquad (t=1,2,\cdots,T). \tag{3-16}$$

这可以由反证法来证明,若对于某个 $t^0(1<t^0\leqslant T)$,有 $I(t^0-1)p(t^0)>0$.不妨设 t^0 是具有这个性质的最小数.记 t^0 以前最近的一次订货发生在周期 t' 开始的时刻 $(1\leqslant t'<t^0)$.现构造一个新的订货量序列 $\{p^*(t),t=1,2,\cdots,T\}$,它与原序列仅在 t' 与 t^0 上不同:

$$p^*(t')=p(t')-I(t^0-1),$$
$$p^*(t^0)=p(t^0)+I(t^0-1).$$

对于 $\{p^*(t)\}$,库存量 $I^*(t)$ 满足

$$I^*(t)=I(t)-I(t^0-1) \qquad (t'\leqslant t<t^0-1),$$
$$I^*(t^0-1)=0.$$

记相应于 $\{p(t)\}$,$\{p^*(t)\}$ 的总费用分别为 $G(p)$ 及 $G(p^*)$,则有

$$\begin{aligned}G(p)-G(p^*)&=cr(I(t')+\cdots+I(t^0-1))-cr(I^*(t')+\cdots+I^*(t^0-1))\\&=cr(t^0-t')I(t^0-1)>0.\end{aligned}$$

这表明 $\{p(t)\}$ 不是一个最优方案,由此得出矛盾.故式(3-16)成立.

现设对于有限的阶段 T,$\{p(t)\}$ 是一个最优方案.假定最后一次订货是在第 x 周期开始的时刻,$1\leqslant x\leqslant T$.因此,$p(x)>0$.由式(3-16),有

$$I(x-1)=0.$$

再由式(3-14)可知,

$$p(x)=\sum_{t=x}^{T}d(t).$$

在周期 $x,x+1,\cdots,T$ 上的总费用为

$$K+cp(x)+\sum_{t=x}^{T}crI(t).$$

若记 $f(t)$ 为到 t 阶段结束时的最小总费用，$t = 1,2,\cdots$，则有如下的泛函方程：

$$\begin{cases} f(T) = \min\limits_{1\leq x\leq T}\left\{K + cp(x) + \sum\limits_{t=x}^{T} crI(t) + f(x-1)\right\}, \\ f(0) = 0. \end{cases} \tag{3-17}$$

这组方程可以递推求解．先算出 $f(1)$，再算出 $f(2)$，…，一直到算出要求的 $f(T)$ 为止．这就是动态规划算法．下面用一个例子来说明求解过程．

例 3 设 $T = 4, K = 5$ 元，$c = 3$ 元/件，$r = 0.3$/周期，相继的需求为 $\{5,4,6,2\}$．求最优订货方案．

解 按式(3-17)，先求 $f(1)$：

$$\begin{aligned} f(1) &= \min_{x=1}\{K + cp(1) + crI(1) + f(0)\} \\ &= (5 + 3\times 5 + 3\times 0.3\times 0) \text{元} = 20 \text{元}. \end{aligned}$$

对于 $T = 2$，有

$$\begin{aligned} f(2) &= \min_{x=1,2}\left\{K + cp(x) + \sum_{t=x}^{2} crI(t) + f(x-1)\right\} \\ &= \min\begin{cases} K + cp(1) + \sum\limits_{t=1}^{2} crI(t) + f(0) & (x = 1), \\ K + cp(2) + crI(2) + f(1) & (x = 2), \end{cases} \\ &= \min(35.6 \text{元}, 37 \text{元}) = 35.6 \text{元}. \end{aligned}$$

故相应于 2 阶段的最优方案为 $p(1) = q$ 件，$p(2) = 0$ 件．

对于 $T = 3$，相仿可求得

$$\begin{aligned} f(3) &= \min_{x=1,2,3}\left\{K + cp(x) + \sum_{t=x}^{3} crI(t) + f(x-1)\right\} \\ &= \min\begin{cases} [5 + 3\times(5+4+6) + 3\times 0.3\times(10+6+0) + 0] \text{元} & (x = 1), \\ [5 + 3\times(4+6) + 3\times 0.3\times(6+0) + 20] \text{元} & (x = 2), \\ [5 + 3\times 6 + 3\times 0.3\times 0 + 35.6] \text{元} & (x = 3), \end{cases} \\ &= \min(64.4 \text{元}, 60.4 \text{元}, 58.6 \text{元}) = 58.6 \text{元}. \end{aligned}$$

故相应于 3 阶段的最优方案为 $\{9,0,6\}$．

对于 $T = 4$，有

$$\begin{aligned} f(4) &= \min\begin{cases} [5 + 3\times(5+4+6+2) + 3\times 0.3\times(12+8+2+0) + 0] \text{元} & (x = 1), \\ [5 + 3\times(4+6+2) + 3\times 0.3\times(8+2+0) + 20] \text{元} & (x = 2), \\ [5 + 3\times(6+2) + 3\times 0.3\times(2+0) + 35.6] \text{元} & (x = 3), \\ [5 + 3\times 2 + 3\times 0.3\times 0 + 58.6] \text{元} & (x = 4), \end{cases} \\ &= \min(75.8 \text{元}, 70 \text{元}, 66.4 \text{元}, 69.6 \text{元}) = 66.4 \text{元}. \end{aligned}$$

于是相应的最优订货方案为 $\{9,0,8,0\}$．最小总费用为 66.4 元．

上述算法虽然可以求得最优订货方案，但是在实际中很少采用．理由是算法不易被实际工作者掌握；此外，当阶段数 T 大时，计算量太大．因此，有不少人提出近似的启发式算法，目的在于减少计算量，使方法更实用．

3.2.2 SM启发式算法

SM启发式近似算法是由锡尔佛(E.A.Silver)和米尔(H.C.Meal)提出的.其基本思想如下:从第一个周期开始,若一次的订货量可以满足 x 周期的需求,则可以算出 x 周期中只包括固定的订货费及保管费在内的平均费用

$$T(x) = \frac{1}{x}(K + cr\sum_{t=1}^{x}(t-1)d(t)).$$

记

$$t_0 = \min\{x: T(x+1) \geqslant T(x)\},$$

即 t_0 为首次满足 $T(x+1) \geqslant T(x)$ 的正整数,也就是,t_0+1 为使平均费用首次增加的周期序号数,则第一次订货量取

$$Q = \sum_{i=1}^{t_0} d(i).$$

其后的步骤是把第 t_0+1 个周期当作初始周期,重新开始上述过程,最终可得一个订货方案.

例4 数据同例3.由启发式算法,有

$$T(1) = 5\text{元},$$

$$T(2) = \frac{1}{2}(5 + 3 \times 0.3 \times 4)\text{元} = 4.3\text{元},$$

$$T(3) = \frac{1}{3}(5 + 3 \times 0.3 \times (4 + 2 \times 6))\text{元} = 6.47\text{元} > 4.3\text{元}.$$

故第1次订货量为 $Q = \sum_{i=1}^{2} d(i) = 9$ 件.

下面再从第3个周期开始计算,有

$$T(1) = 5\text{元},$$

$$T(2) = \frac{1}{2}(5 + 3 \times 0.3 \times 2)\text{元} = 3.4\text{元}.$$

因此,第2次订货量为 $Q = (6+2)$ 件 $= 8$ 件.

由启发式算法可得订货量序列{9,0,8,0}.与例3的结果比较,它恰为最优方案,这当然只是一种巧合.启发式算出的订货方案其相应的总费用,如表3-1所示.

表3-1 件

周期	1	2	3	4	总计
初始库存量	0	4	0	2	–
订货量	9	0	8	0	17
需求量	5	4	6	2	17
期末库存量	4	0	2	0	6

注意，表中第 1 个周期末的库存量即为第 2 个周期开始时的初始库存量. 由表 3-1 可知，其总费用为

$$(2\times 5+3\times 17+3\times 0.3\times 6)\text{ 元}=66.4\text{ 元},$$

其中第一项为方案中 2 次订货的固定费用，第二项为货物的总价值，第三项表示方案中共有 6 件货物存贮了一个周期所需的保管费.

在许多实际问题中，需求量虽然是非平稳的，但可能起伏不大. 此时可以采用更简便的近似方法，即对于平均需求率

$$\overline{D}=\frac{1}{T}\sum_{i=1}^{T}d(i),$$

利用最佳订货量公式来求出订货量，然后根据问题中的数据定出每个周期开始时的订货量. 为此，需要有一个标准，用来判断何时可以用平均需求率 $\overline{D}$ 的 EOQ 公式，而不致偏差最优方案太远.

令
$$V=\sqrt{\frac{1}{T}\sum_{i=1}^{T}(d(i)-\overline{D})^2},\quad \mathrm{VC}=\frac{V}{\overline{D}},$$

其中 VC 的定义与离散随机变量的变异系数相同，反映出需求的变化程度.

根据经验，若 $\mathrm{VC}<0.45$，则可用平均需求率 $\overline{D}$ 的 EOQ 公式处理，否则表明需求率变化较大，则可用启发式算法.

例 5　数据同例 3，此时有

$$D=4.25,\quad \mathrm{VC}=0.32.$$

因此，可用 D 的 EOQ 公式处理，

$$Q=\sqrt{\frac{2\overline{D}K}{cr}}=6.9\text{ 件}.$$

若取 $Q=7$ 件，由于第 1 个周期中的需求量是 5 件，第 1，2 两个周期中的总需求量为 9 件，7 件处在 5 件与 9 件的中间，但 6.9 件更接近于 5 件，故取 $p(1)=5$ 件. 而第 2，3 周期的总需求量为 10 件，与以上相仿的理由取 $p(2)=4$ 件. 第 3，4 周期中的总需求量为 8 件，故取 $p(3)=8$ 件，此时 $p(4)=0$，于是得订货序列 $\{5,4,8,0\}$. 用表 3-1 所示的方式可以求出此方案的总费用为 67.8 元，比最优方案要多支出 1.4 元.

4　随机库存模型

前两章讨论的库存模型中，需求、供给及供货滞后等有关的量都假定为确定性的. 然而，实际问题中常有许多不确定的因素. 例如需求量，在很多情况下是事先无法确定的，因此假定为随机变量才更符合实际. 在理论模型中，假设需求为随机变量而其他量为确定性型时结果比较完整. 本章主要介绍单品种货物、一个存货场所的随机需求模型.

随机需求模型可以分为周期盘点与连续盘点两大类. 周期盘点模型中又可分为单周期、多周期及无穷周期模型等.

单周期模型只有一个周期,决策者只在周期开始时有一次决策(订货)的机会.典型的单周期模型是“报童问题”.每天报童购入当日报纸,购入量是决策变量.一天的需求量不能事先确定,但可假定服从已知分布.若购入量过少,则供不应求,收入有损失;若购入的报纸销售不完,则过剩的报纸也会造成损失.那么,如何根据需求分布以及各种费用参数进行决策,以使费用的期望值达到极小(或者考虑使利润最大)?这就是单周期模型要解决的问题.

多周期模型考虑系统在 $n(1 < n < \infty)$ 个周期中运行,决策者在每个周期开始时都需做一次决策.与单周期模型不同的是,每次决策时不是考虑使该周期达到最优,而是使 n 个周期的总体达到最优.

无穷周期模型考虑系统一直运行下去,决策准则通常是使单位时间的平均期望费用或折扣总期望费用达到极小.

在研究库存控制的优化时,希望解决如下两个问题:最优策略具有何种形式;最优策略的求法.在相当广泛的范围内,(s,S) 被证明为最优策略.但在随机模型中,一般不容易求出 s 及 S 的值.实用中常常通过多种方式来简化求解 s,S 的过程.例如假定 $S-s$ 为已知,这可减少未知数的个数;另外还可采用安全库存量等方法来简化求解过程.

4.1 单周期模型

研究单周期模型的重要性主要表现在两个方面:一方面是它可以用来近似描述某些实际的库存问题,例如对于经营季节性商品或时尚物品的商店,其进货问题可以用单周期模型来描述;另一方面,单周期模型简单,它为进一步研究多周期动态模型打下基础.单周期模型的假定如下.

1° 在周期开始时作一次订货决策.

2° 瞬时供货.

3° 一个周期中的需求量 D 是非负随机变量,假定其分布及密度函数分别为 $F(x)$ 及 $f(x)$, $x \geqslant 0$.

4° 费用包括订货费、存货费及缺货损失费.订货费 $C_1(z)$ 由式(1-1)给出.存货费在周期末结算,它与期末的库存量成正比,比例系数为 r.在需求是随机的情况下,缺货的可能性总是存在的.假定缺货损失费与缺货量成正比,比例系数记作 p,并设 $p > c$(否则有 $p \leqslant c$,表明不进货费用最小,这种情形没有研究的必要).

5° 决策准则是期望总费用最小.

下面讨论最优决策的形式及其参数的确定.

设初始库存的水平为 x,作出决策之后的库存量为 y(即订货量为 $y-x$),则订货费为

$$C_1(y-x) = \begin{cases} K + c(y-x) & (y > x), \\ 0 & (y = x). \end{cases}$$

期望存货费及期望缺货损失费分别为

$$rE(y-D)_+ = r\int_0^y (y-x)f(x)\mathrm{d}x,$$

$$pE(D-y)_+ = p\int_y^\infty (x-y)f(x)\mathrm{d}x.$$

其中 $(x)_+ = \max(0,x)$. 记

$$L(y) = rE(y-D)_+ + pE(D-y)_+, \tag{4-1}$$

则总期望费用

$$A(y) = \begin{cases} K + c(y-x) + L(y) & (y > x), \\ L(y), & (y = x). \end{cases} \tag{4-2}$$

由式(4-1)容易求出

$$L'(y) = (r+p)F(y) - p,$$
$$L''(y) = (r+p)f(y) \geqslant 0.$$

因此 $L(y)$ 为凸函数. 再令

$$G(y) = cy + L(y). \tag{4-3}$$

显然,$G(y)$ 亦是一个凸函数. 令 S 为使函数 $G(y)$ 达极小值的点,即

$$cS + L(S) = \min_{y\geqslant x} G(y). \tag{4-4}$$

再令

$$s = \min\{y: G(y) = K + G(S)\}, \tag{4-5}$$

其关系曲线如图4-1所示.

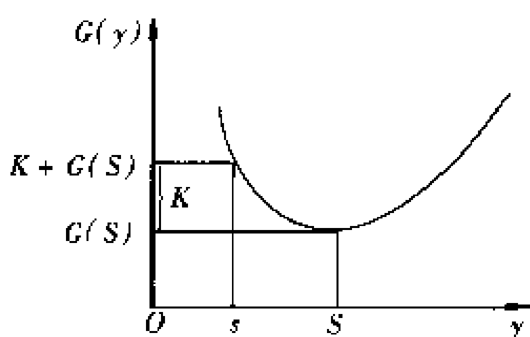


图4-1

这里不加证明地引用如下的定理,它给出了最优策略的形式.

定理1 单周期随机库存模型的最优订货策略为(s,S)型,即当初始库存量 $x < s$ 时订货至S;当 $x \geqslant s$ 时不订货. s,S 分别由式(4-5)及式(4-4)确定.

由定理1可知,确定最优的 s 及 S 的步骤如下.

(1) 求 S 由于 S 是使 $G(y)$ 达极小值的点,故可由 $G'(y) = 0$ 解出 S. 由式(4-3)可知,S 应满足

$$F(S) = \frac{p-c}{p+r}. \tag{4-6}$$

(2) 求 s 设 S 已求出,则 s 应满足

$$cs + L(s) = K + cS + L(S).$$

若记 $Q = S - s$,由式(4-1),经化简,上式变为

$$(p-c)Q - (r+p)\int_0^Q F(S-x)\mathrm{d}x = K. \tag{4-7}$$

由上式求得 Q,进而可求出 s.

例1 设需求量 D 服从参数λ的指数分布,即 D 有密度函数及分布函数:

$$f(x) = \lambda \exp(-\lambda x); \quad F(x) = 1 - \exp(-\lambda x) \qquad (x \geqslant 0). \tag{4-8}$$

由式(4-6)容易解出

$$S = -\frac{1}{\lambda}\ln\left(\frac{c+r}{p+r}\right). \tag{4-9}$$

由式(4-7),Q 满足方程

$$(p-c)Q - (r+p)\int_0^Q (1-\exp(-\lambda(S-x)))\mathrm{d}x = K.$$

简化后,得

$$\exp(\lambda Q) = 1 + \lambda Q + \frac{\lambda K}{c+r}. \tag{4-10}$$

它可由数值方法求解.由上式亦可求得 Q 的近似解.当 λQ 比较小时,展开 $\exp(\lambda Q)$,取到二阶项,此时可得

$$\frac{\lambda^2}{2}Q^2 \approx \frac{\lambda K}{c+r}.$$

故有

$$Q^* \approx \sqrt{\frac{2K}{\lambda(c+r)}}. \tag{4-11}$$

注意到需求量 D 的均值为 $1/\lambda$,故上式右端与2.1节中基本模型的EOQ公式相仿.

例如,取 $\lambda = 0.01, p = 4, c = 2, K = 3, r = 1$.由式(4-10),有

$$\exp(\lambda Q) = 1.01 + \lambda Q.$$

故可解得 $\lambda Q = 0.138$.因此 $Q = 13.8 \approx 14$.

由式(4-9),可得 $\qquad S = 51.1, \quad s = S - Q = 52 - 14 = 38.$

故 $(s,S) = (38,52)$.

如果利用近似公式(4-11),则可得 $Q^* = 14.2$,取作15,相应的 $s^* = 37$,与最优策略(38,52)相差很小.

例2 设需求量 D 遵从 $N(\mu,\sigma^2)$.这里假定 $\sigma \ll \mu$.由于 $P(D<0) = \Phi(-\frac{\mu}{\sigma}) \approx 0$,因此,实用上可以把 $N(\mu,\sigma^2)$ 当作一个描述需求量的分布函数.此时,D 有分布函数 $\Phi(\frac{x-\mu}{\sigma})$,其中 $\Phi(x)$ 是 $N(0,1)$ 的分布函数.由式(4-7),有

$$S = \mu + \sigma\Phi^{-1}\left(\frac{p-c}{p+r}\right), \tag{4-12}$$

其中 Φ^{-1} 是 Φ 的反函数,可以由 $N(0,1)$ 的分布表查到.由式(4-7)可知,Q 满足超越方程

$$(p-c)Q - (r+p)\int_0^Q \Phi\left(\frac{S-\mu-x}{\sigma}\right)\mathrm{d}x = K. \tag{4-13}$$

由式(4-13),可以通过数值方法解出 Q,于是可得 (s,S).

例如,D 遵从 $N(100,10^2)$,其他数据同例1,则由式(4-12),可得

$$S = 100 + 10 \times \Phi^{-1}(\frac{2}{5}) = 97.5 \approx 98.$$

利用 $\Phi(x)+\Phi(-x)=1$，式(4-13)可具体写成

$$2Q-5\int_0^Q\left(1-\Phi\left(\frac{x+\mu-S}{\sigma}\right)\right)\mathrm{d}x=3,$$

即只要解

$$5\int_0^Q\Phi\left(\frac{x+\mu-S}{\sigma}\right)\mathrm{d}x-3Q=3.$$

利用数值方法，在上式中代入 μ,σ 的具体数据，即可解出 $Q=5.78\approx6$，$s=S-Q=98-6=92$. 因此，最优订货方案为(92,98).

例 3 设需求量 D 遵从伽玛分布，相应的密度函数为

$$g(t)=\frac{\lambda^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)}t^{\alpha-1}\exp(-\lambda t)\qquad(t>0),$$

其中 $\lambda=0.01$；$\alpha=2.5$. 其余数据同例1. 记相应于 $g(t)$ 的分布函数为 $G(t)$，则由

$$G(S)=\frac{2}{5}$$

可以解出 $S=182.8\approx183$. 按式(4-7)，Q 由

$$2Q-5\int_0^Q G(S-x)\mathrm{d}x=3$$

解出. 利用数值方法，求出 $Q=19.93\approx20$. 故最优订货策略为(163,183).

注意：若模型中的假定 3° 改为

3°′ 需求量 D 是均值为 d 的非负离散随机变量，

$$P\{D=k\}=f_k\qquad(k=0,1,2,\cdots),$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}f_k=1,$$

此时最优策略仍是 (s,S) 型的.

在离散随机需求下，求最优策略中参数 s,S 的步骤如下.

(1) 先求 S S 满足

$$G(S)\leqslant G(S-1),\quad G(S)\leqslant G(S+1),\tag{4-14}$$

其中 $G(y)$ 由式(4-3)给出，具体写出并经过化简，得

$$G(y)=pd-(p-c)y+(p+r)\sum_{j=0}^{y-1}g(j),$$

其中

$$g(j)=\sum_{i=0}^{j}f_i.$$

由式(4-14)，S 由下式确定：

$$g(S-1)\leqslant\frac{p-c}{p+r}\leqslant g(S).\tag{4-15}$$

(2) 求 s s 是满足下式的最小整数：

$$G(s)\leqslant K+G(S).$$

即求最小的 s，满足

$$(p+r)\sum_{j=0}^{s-1}g(j)-(p-c)s\leqslant K+(p+r)\sum_{j=0}^{S-1}g(j)-(p-c)S.\tag{4-16}$$

例 4 假设需求服从几何分布

$$P\{D = k\} = \alpha\beta^k \qquad (k = 0,1,2,\cdots),$$

其中 $\alpha,\beta > 0,\alpha + \beta = 1$.此时显然有 $g(j) = 1 - \beta^{j+1}$.由式(4-14),S 应满足

$$\beta^{S+1} \leqslant \frac{c + r}{p + r} \leqslant \beta^S.$$

记 $Q = S - s$,则由式(4-16),经过整理,Q 为满足下面方程的最大整数:

$$\beta^Q(1 + \frac{\alpha}{p + r}(K + (c + r)Q)\beta^{-S-1}) \geqslant 1.$$

例如,取 $\alpha = 0.1,\beta = 0.9$,其余数据同例 1,则 S 应满足

$$0.9^{S+1} \leqslant \frac{3}{5} \leqslant 0.9^S.$$

故 $S = 4$.而 Q 为满足下式的最大整数

$$0.9^Q(1 + \frac{0.1}{5} \times 0.9^{-5}(3 + 3Q)) \geqslant 1.$$

不难求得 $Q = 3$,因而 $s = 1$.故最优订货策略为(1,4).

若取 $\alpha = 0.4,\beta = 0.6$,其余数据同例 1.此时 $S = 1,Q = 2$.于是 $s = -1$.最优订货策略为$(-1,1)$.这个结论初看起来似乎不合理.事实上,仔细分析其需求量可发现,一个周期中的平均需求量仅为 $\beta/\alpha = 1.5$,而固定的订货费及保管费很大,因此,如果没有事先肯定的一定量的拖欠(反映为初始库存量为负数),经营这类商品是无利可图的.因而当初始库存量为 0 时不定货.

例 5 假定需求 D 服从参数 λ 的泊松分布

$$P\{D = k\} = \frac{\lambda^k}{k!}\exp(-\lambda) \qquad (k = 0,1,2,\cdots).$$

显然,均值 $d = ED = \lambda$.记

$$g(j) = \exp(-\lambda)\sum_{i=0}^{j}\frac{\lambda^i}{i!}.$$

由式(4-15)可知,S 由

$$g(S - 1) \leqslant \frac{2}{5} \leqslant g(S)$$

确定.利用数值方法可得 $S = 97$.由式(4-16)可知,s 为满足下式的最小 s:

$$5\sum_{j=0}^{s-1}g(j) - 2s \leqslant 3 + 5\sum_{j=0}^{96}g(j) - 2 \times 97,$$

可求得,$s = 91$.因此,最优订货策略为(91,97).

4.2 多周期模型

本节把 4.1 节中模型的周期数增至大于 1 的 n.假定各周期的需求量是与 D 独立同分布的随机变量,密度函数及分布函数分别记作 $f(x)$ 及 $F(x)$,$x \geqslant 0$.各周期中的费用结构与 4.1 节中的相同.当某个周期的需求超过供给时,库存水平记作负值,其不足部分在下一次进货时立即补足(只有最后一个周期除外).每个周期结束

时都对库存水平进行一次盘点，并对下个周期作出订货量的决策，目标是使 n 个周期的期望折扣费用达最小.

n 周期库存模型的优化问题可用动态规划中的最优化原理来分析. 按最优化原理，可把周期的序号倒排，即把最后一个周期称作周期 1，倒数第 2 个周期称作周期 2，…，倒数第 n 个周期称作周期 n. 记 $\alpha(0<\alpha\leqslant 1)$ 为折扣因子，取目标函数为 n 个周期的折扣总费用. 记 $V_j(x)$ 为周期 j 初始库存水平为 x 时，周期 1 到 j 的折扣总期望费用. 约定 $V_0(x)=0$. 根据最优化原理，对于 $j=1,2,\cdots,n$，可得如下递推关系：

$$V_j(x)=\min_{y\geqslant x}\left\{K\delta(x,y)+c(y-x)+L(y)+\alpha\int_0^{\infty}V_{j-1}(y-u)f(u)\mathrm{d}u\right\},$$

其中

$$\delta(x,y)=\begin{cases}1 & (x<y),\\ 0 & (x=y);\end{cases}$$

$$L(y)=\begin{cases}rE(y-D)_{+}+pE(D-y)_{+} & (y\geqslant 0),\\ pE(D-y) & (y<0).\end{cases}$$

在 $V_j(x)$ 表达式中，右端大括号里的头二项之和表示在第 j 周期之初把库存水平增加到 y 时(即订货量为 $y-x$)所需的期望费用. 若第 j 周期的需求量为 u，则第 $j-1$ 周期的初始库存为 $y-u$，那么在头 $j-1$ 个周期中的期望折扣总费用为 $\alpha V_{j-1}(y-u)$. 故大括号中最后一项为第 j 周期有初始库存 y 时，头 $j-1$ 个周期的期望折扣总费用.

可以证明，对于 n 周期的动态模型，其最优策略由一列临界数对 $\{(s_j,S_j),j=1,2,\cdots,n\}$ 给出. 即当周期 j 的初始库存水平为 x 时，若 $x<s_j$，则订货至 S_j；否则不订货，$j=1,2,\cdots,n$.

对于 $j=1,2,\cdots,n$，令

$$G_j(y)=cy+L(y)+\alpha\int_0^{\infty}V_{j-1}(y-u)f(u)\mathrm{d}u. \tag{4-17}$$

若采用 $\{(s_j,S_j)\}$ 策略，则有

$$V_j(x)=\begin{cases}K+G_j(S_j)-cx & (x<s_j),\\ G_j(x)-cx & (x\geqslant s_j).\end{cases} \tag{4-18}$$

对于 n 周期动态模型，要想得到最优参数的值，可以利用递推公式(4-17)及式(4-18)，但是，计算量一般很大. 目前尚无在实用上方便简洁的方法. 但当 n 较大时，可以用下节介绍的稳态模型来近似.

4.3　基于稳态分析的随机库存模型

前面讨论的多阶段随机库存模型的实质是利用动态规划的最优化原理，把问题的求解化为一个多阶段决策过程. 基于稳态分析的随机库存模型的求解思路是，假定讨论的周期是无限时段，先对库存水平(随机过程)进行稳态分析，然后根据所采用的订货策略和系统的费用结构，对稳态下单位时间系统运行的期望平均费

用(或折扣费用)求极小,从而求出最优策略中的参数.

下面先从最简单的随机模型开始讨论.

4.3.1 单个需求连续盘点的随机库存模型

该模型的假定如下.

1° 相邻单个需求之间的时间间隔独立同分布,记随机变量为 X,有密度函数 $f(x)$,分布函数 $F(x)$,$x \geqslant 0$. 为处理方便起见,假定 $t = 0$ 时恰有一个需求发生.

2° 订货后瞬时交货.

3° 采用(s,S)策略. 由于每次需求量是单个,故当库存量为 s 时应立即订货,订货量为 $Q = S - s$,是一个常数.

4° 费用仅包括订货费与保管费,其形式同 4.1 节中的模型. 由于是瞬时交货,故可不计缺货损失费.

记 $H(t)$ 为时刻 t 系统的库存量,$t \geqslant 0$. 不妨设初始库存量为

$$H(0+) = s + i \qquad (1 \leqslant i \leqslant Q).$$

显然,$\{H(t), t \geqslant 0\}$ 是一个有限状态 $\{s+1, s+2, \cdots, s+Q\}$ 上取值的时间连续的随机过程. 记

$$p_j(t) = P\{H(t) = s + j\} \qquad (j = 1,2,\cdots,Q),$$

$$p_j = \lim_{t \to \infty} p_j(t) \qquad (\text{若存在的话}).$$

下面利用更新过程理论来证明 p_j 存在,并求出其值.

若把 $H(t)$ 相继进入状态 $s+i$ 的时刻记成 $W_1, W_2, \cdots$,由库存量的初始条件可知,$t = 0$ 时亦有 $H(0_+) = s + i$,故 $W_1, W_2 - W_1, W_3 - W_2, \cdots$ 独立同分布. 由于需求是单个的,因此这个公共的分布函数为 $F_Q(x)$,它是 F 的 Q 重卷积. 由更新报酬定理[3]知,在稳态($t \to \infty$ 时)下,$H(t)$ 处在状态 $s+j$ 的概率有极限 p_j,且

$$p_j = \frac{EX}{EW_1} = \frac{EX}{QEX} = \frac{1}{Q} \qquad (j = 1,2,\cdots,Q).$$

若记 H 为稳态下的库存量,则

$$P\{H = s + j\} = \frac{1}{Q} \qquad (j = 1,2,\cdots,Q).$$

即 H 是 $\{s+1, s+2, \cdots, s+Q\}$ 上的一个离散均匀分布.

下面来求目标函数. 它是稳态下单位时间系统运行的期望费用,记作 $G(s,Q)$,这里 s, Q 为决策变量.

记 Y 为相邻订货之间的时间间隔,D 为单位时间中的平均需求量,则有

$$D = \frac{1}{EX}, \quad EY = QEX = \frac{Q}{D}.$$

而单位时间中的平均订货次数为 $(EY)^{-1} = \dfrac{D}{Q}$,稳态下的期望库存量为

$$EH = \sum_{i=1}^{Q} (s + i) \frac{1}{Q} = s + \frac{1}{2}(Q + 1).$$

因此,稳态下单位时间中的期望费用为

$$G(s,Q)=\frac{1}{EY}(K+cQ)+rEH=cD+\frac{DK}{Q}+r\left[s+\frac{1}{2}(Q+1)\right].$$

要使 $G(s,Q)$ 达极小,只要取 $s=0$,而对于 Q,只需使

$$G(Q)=\frac{DK}{Q}+\frac{1}{2}rQ$$

达到极小.由于 Q 只取整数值,故 Q 应满足

$$Q(Q-1)\leqslant\frac{2KD}{r}\leqslant Q(Q+1).$$

4.3.2 周期盘点随机库存模型

仍采用先对库存水平进行稳态分析,然后在给定的策略类中,对给定的费用结构及目标函数求最优策略中的参数的方法来讨论模型.

称相邻盘点之间的时间为一个周期.周期长度已知,不妨取成单位时间.

周期盘点随机库存模型有如下假定.

1° 第 n 个周期的需求为 D_n,D_n 独立同分布,$n=1,2,\cdots$,记随机变量为 D,其密度函数及分布函数分别记作 $f(x)$ 及 $F(x)$,$x\geqslant 0$.

2° 在每个周期开始时作一个决策,采用 (s,S) 策略.供货滞后时间为0,缺货事后补足.

3° 费用结构同4.1节单周期模型中的4°.

4° 目标函数为稳态下单位时间平均期望费用最小.

记第 n 个周期开始时已作出决策后的库存水平为 X_n,T_n 为第 n 次订货的时刻,$n=1,2,\cdots$.约定 $X_0=S$,$T_0=0$.由于在各个周期中的需求量独立同分布,因此序列 $\{X_n,n=0,1,2,\cdots\}$ 为时间离散状态连续的马尔可夫(Markov)链;而 $T_1,T_2,\cdots$ 则为一个离散分布的更新过程,T_i-T_{i-1} 独立同分布,$i=1,2,\cdots$,且在每一个更新时刻(即订货时刻),都有

$$X_{T_n}=S\qquad(n=0,1,2,\cdots).$$

假定系统处在稳态,仍用 X_n 记稳态下第 n 个周期初作出决策后的库存水平.下面来讨论 X_n 的分布.

X_n 以一个正概率取值 S.这是由于

$$P\{X_n=S\}=P\{n,n\text{ 为更新过程 }T_1,T_2,\cdots\text{ 的更新时刻}\}=\frac{1}{E(T_i-T_{i-1})}.$$

上式在直观上是容易看出的,因为只有经过每次订货,库存水平才能恢复到 S.因此,库存水平为 S 的机会在相邻订货间隔中间只有一次,故上式成立.

由于 T_i-T_{i-1} 独立同分布,$i=1,2,\cdots$,故

$$E(T_i-T_{i-1})=ET_1=\sum_{k=1}^{\infty}kP\{T_1=k\}=\sum_{k=1}^{\infty}P\{T_1\geqslant k\}.$$

若记 $Q=S-s$,则有

$$P\{T_1\geqslant k\}=P\left\{\sum_{i=0}^{k-1}D_i\leqslant Q\right\}=F_{k-1}(Q).$$

这里约定 $D_0 = 0$; $F_0(x) = 1, x \geqslant 0$; F_{k-1} 为 F 对其自身的 $k-1$ 次卷积. 于是平均订货间隔

$$M(Q) = ET_1 = \sum_{k=1}^{\infty} F_{k-1}(Q) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} F_k(Q). \tag{4-19}$$

因此

$$P\{X_n = S\} = \frac{1}{M(Q)}. \tag{4-20}$$

记 $\psi(x)(s \leqslant x < S)$ 为 X_n 在$[s, S)$上的密度函数. 利用上式及系统处在稳态的条件, 有

$$\begin{aligned}
\psi(x)\mathrm{d}x &= P\{x < X_n \leqslant x + \mathrm{d}x\} \\
&= P\{x < X_n \leqslant x + \mathrm{d}x, X_{n-1} = S\} + P\{x < X_n \leqslant x + \mathrm{d}x, s \leqslant X_{n-1} < S\} \\
&= P\{X_{n-1} = S\} P\{x < X_n \leqslant x + \mathrm{d}x \mid X_{n-1} = S\} + \\
&\quad \int_s^S P\{x < X_n \leqslant x + \mathrm{d}x \mid X_{n-1} = u\} \psi(u)\mathrm{d}u \\
&= \frac{1}{M(Q)} P\{S - x - \mathrm{d}x \leqslant D_{n-1} < S - x\} + \int_x^S P\{u - x - \mathrm{d}x \leqslant D_{n-1} < u - x\} \psi(u)\mathrm{d}u \\
&= \frac{1}{M(Q)} f(S - x)\mathrm{d}x + \int_x^S f(u - x)\psi(u)\mathrm{d}u\mathrm{d}x.
\end{aligned}$$

因此, 有

$$\psi(u) = \frac{1}{M(Q)} f(S - x) + \int_x^S f(u - x)\psi(u)\mathrm{d}u. \tag{4-21}$$

作变换, 令

$$v = S - x, \quad g(v) = \psi(S - v), \tag{4-22}$$

则式(4-21)变为

$$g(v) = \frac{1}{M(Q)} f(v) + \int_0^v f(v - t) g(t)\mathrm{d}t \qquad (0 < v \leqslant Q).$$

这是一个更新方程, 其解[3]为

$$g(v) = \frac{1}{M(Q)} \sum_{n=1}^{\infty} f_n(v) \qquad (0 < v \leqslant Q), \tag{4-23}$$

其中

$$f_1 = f,$$

$$f_{n+1}(x) = \int_0^x f_n(x - t) f(t)\mathrm{d}t \qquad (n = 1, 2, \cdots).$$

将式(4-22)的 $v, g(v)$ 代入式(4-21), 即有

$$\psi(x) = \frac{1}{M(Q)} \sum_{n=1}^{\infty} f_n(S - x) \qquad (s \leqslant x < S). \tag{4-24}$$

由式(4-20)及式(4-24)知, X_n 的平稳分布在$[s, S)$中有密度函数 $\psi(x)$, 而在 S 点有正概率. 因此, X_n 的平稳分布 $\Psi(x)$ 在 S 点上有跳跃, 如图 4-2 所示.

下面利用平稳分布来分析费用.

(1) 订货费　由于出现缺货时, 事后都予以补足, 一个周期的平均订货量就等于平均需求量, 故一次进货的平均货物的价值为 cED. 而对于一个周期, 存在着订

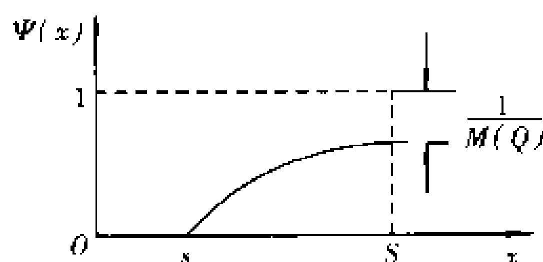


图 4-2

货与否的两种可能性，订货的概率由式(4-20)给出，固定的订货费为$\frac{K}{M(Q)}$，因此一个周期(单位时间)中的订货费为

$$C_1 = cED + \frac{K}{M(Q)}. \tag{4-25}$$

(2) 保管费与缺货损失费　当周期开始时的库存水平 x 已知时，一个周期中的期望保管费与缺货损失费分别为 $rE(x-D)_+$，$pE(D-x)_+$. 记

$$\begin{aligned} L(x) &= rE(x-D)_+ + pE(D-x)_+ \\ &= r\int_0^x (x-u)f(u)\mathrm{d}u + p\int_x^\infty (u-x)f(u)\mathrm{d}u. \end{aligned}$$

在稳态下，周期开始时的库存水平为 X_n，其分布密度为 $\psi(x)$，因而期望保管费与缺货损失费为

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} L(x)\psi(x)\mathrm{d}x &= \frac{L(S)}{M(Q)} + \int_s^S L(x)\psi(x)\mathrm{d}x \\ &= \frac{L(S)}{M(Q)} + \int_0^Q L(S-x)\psi(S-x)\mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{4-26}$$

由式(4-25)及式(4-26)，即得一个周期中的期望总费用

$$F(Q,S) = cED + \frac{K + L(S)}{M(Q)} + \int_0^Q L(S-x)\psi(S-x)\mathrm{d}x. \tag{4-27}$$

使 $F(Q,S)$ 达极小值的 Q,S 便是最优的.

例 6　假定每周期的需求量服从参数为 λ 的指数分布. 此时有密度函数

$$f(x) = \lambda\exp(-\lambda x) \qquad (x \geqslant 0).$$

于是

$$ED = \frac{1}{\lambda},$$

$$f_n(x) = \frac{\lambda^n}{(n-1)!}x^{n-1}\exp(-\lambda x), \quad \sum_{n=1}^{\infty} f_n(x) = \lambda,$$

$$F_n(x) = \int_0^x f_n(t)\mathrm{d}t = 1 - \exp(-\lambda x)\sum_{i=0}^{n-1}\frac{(\lambda x)^i}{i!} = \exp(-\lambda x)\sum_{i=n}^{\infty}\frac{(\lambda x)^i}{i!},$$

$$M(Q) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} F_n(Q) = 1 + \lambda Q,$$

$$\psi(x) = \frac{\lambda}{1+\lambda Q} \qquad (s \leqslant x < S).$$

经过一些计算，得

$$L(x) = r\left(x - \frac{1}{\lambda}\right) + \frac{r+p}{\lambda}\exp(-\lambda x).$$

按式(4-27)，期望总费用可具体表示为

$$F(Q,S)=\frac{c}{\lambda}+\frac{1}{1+\lambda Q}\Big(K+r\Big(S-\frac{1}{\lambda}-Q+\lambda QS-\frac{1}{2}\lambda Q^2\Big)+\frac{r+p}{\lambda}\exp(-\lambda(S-Q))\Big).$$

若把上式写成 $s=S-Q$ 与 Q 的函数,则总费用可表示为

$$G(s,Q)=\frac{c}{\lambda}+\frac{1}{1+\lambda Q}\left(K+r\Big(s-\frac{1}{\lambda}+\lambda sQ+\frac{1}{2}\lambda Q^2\Big)+\frac{r+p}{\lambda}\exp(-\lambda s)\right). \tag{4-28}$$

将上式对 s 求偏导数,并令其为0,即

$$0=\frac{\partial G}{\partial s}=r-\frac{r+p}{1+\lambda Q}\exp(-\lambda s),$$

可得

$$\exp(-\lambda s)=\frac{r(1+\lambda Q)}{r+p}. \tag{4-29}$$

将式(4-28)对 Q 求偏导数,并令其为0,有

$$0=\frac{\partial G}{\partial Q}=\frac{1}{(1+\lambda Q)^2}\Big(\lambda rQ\Big(1+\frac{1}{2}\lambda Q\Big)+r-K-(r+p)\exp(-\lambda s)\Big).$$

利用式(4-29),得

$$\frac{1}{2}\lambda rQ^2=K.$$

于是得最佳值

$$Q=\sqrt{\frac{2K}{\lambda r}},\quad s=-\frac{1}{\lambda}\ln\frac{r\Big(1+\sqrt{\frac{2\lambda K}{r}}\Big)}{r+p}.$$

不难验证,$G(s,Q)$ 相应的黑塞(Hessian)矩阵

$$G_H=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial^2 G}{\partial s^2} & \dfrac{\partial^2 G}{\partial s\partial Q}\\[2ex] \dfrac{\partial^2 G}{\partial s\partial Q} & \dfrac{\partial^2 G}{\partial Q^2}\end{bmatrix}$$

在 $M=(s,Q)$ 点取值时是一个正定矩阵.因此,M 是 G 的一个最小值点.

4.4 基于安全库存量的随机库存模型

由于需求的随机性,缺货总是可能的.直观上容易想到,在订货时应该既要考虑到滞后时间中的平均需求量,又要顾及需求可能出现的波动性.这种随机的波动性可以通过下面将要引入的安全库存量加以控制.通过安全库存量的正确选择,在一定的费用结构下可以使系统的运行状况最佳.

下面分别讨论随机需求和供货滞后时间为常数的库存模型的几种典型的情形.

4.4.1 (s,Q) 策略，Q 已知

模型有如下假定.

1° 连续盘点，系统在稳态下运行.

2° 供货滞后时间是常数 L，缺货事后补足.

3° 需求是平稳的，在一个长度为 L 的时间间隔中的需求量为 X，遵从 $N(\mu_L, \sigma_L^2)$ 分布. 下面为书写简单起见，省去 μ_L 和 σ_L^2 所带的下标.

4° 采用 (s,Q) 策略，Q 已知.

5° 费用包括订货费、保管费及缺货损失费. 订货费及保管费与 2.1 节确定性库存基本模型的相同，缺货损失费可由不同的量来刻画，例如：

① 每一次缺货带来损失 B_1(元)，它与缺货数量及缺货时间无关，这种情形发生在临时采取某种行动(如紧急空运)所需的额外费用. 目的是防止即将出现的短缺；

② 每缺货一个单位，其缺货费用为 cB_2，其中 c 为单价，B_2 为比例因子，这里 cB_2 可以解释为由于缺货导致加班生产而引起每单位货物额外增加的成本.

可以根据问题的不同情况选择一种缺货损失费.

6° 目标函数为单位时间中的平均期望费用. 模型中的决策变量为 s.

那么，如何确定 s 使其平均期望费用最小呢？

为此，引进如下记号. 记

OH 为现有库存量，指能马上满足需求的库存量；

OQ 为订货量；

BO 为延期交货的货物量，指由于缺货而未能满足的那部分需求量；

NS = OH − BO 为净库存量. 当净库存量大于 0 时表示现有库存量，小于 0 时表示缺货量；

I = NS + OQ = OH − BO + OQ 为库存水平，表示可望用于满足需求的库存量(包括已订货但尚未到货的量).

上述诸量都是随机的，一般都依赖于时间 t. 但模型假定系统在稳态下运行，因此这些量不依赖于 t.

记 Y 为相邻订货之间的时间间隔. 称这个间隔为一个周期. 不妨设 $t = 0$ 时恰好一个周期开始. 库存水平随时间 t 的变化如图 4-3 所示.

再记一个周期中的平均缺货量为 SC，**安全库存量**为 SS. 安全库存量定义为补充的订货量到达前一时刻的期望净库存量. 若用 s_1 记订货前一时刻的库存水平，则 SS 可表为

$$\mathrm{SS} = E(s_1 - X).$$

在应用上可以接受的一种近似为：$s - s_1$ 与供货滞后时段中的需求量 X 比较而言小得多，因此有 $s_1 \approx s$，故

$$\mathrm{SS} = E(s - X) = s - \mu.$$

由于需求 X 的随机性，为了尽量避免需求随机波动带来的缺货问题，令安全库存量与需求的标准差 σ 成正比，即令

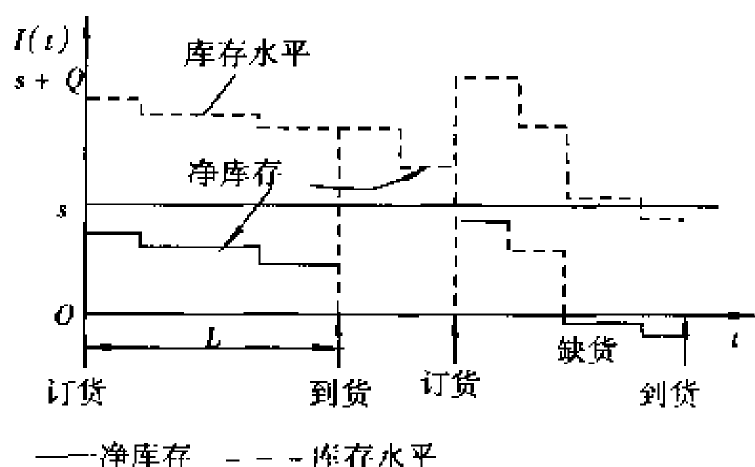


图 4-3

$$SS = s - \mu = k\sigma,$$

其中 k 称为**安全因子**,是一个待定的常数.显然,k 越大,滞后时间中的需求得到满足的可能性越大.另外,从管理的角度出发,有一个至少应满足的最小安全因子 $k^*(k^* \geqslant 0)$.因此,要求的 k 必须满足 $k \geqslant k^*$.于是最终订货点的库存量

$$s = \mu + k\sigma.$$

下面通过不同的费用函数来求得 k.

(1) 保管费　一个库存周期也可以看成是相邻到货之间的时间间隔.因此,

一次到货前一时刻的期望现有库存量 $= E(s - X)_+$,

一次到货后的期望现有库存量 $= E(s - X) + Q$.

由于实际库存系统中每个周期的缺货概率应很小,故近似地有

$$E(s - X)_+ \approx E(s - X) = s - \mu = k\sigma.$$

又由于需求量是平稳的(即在任一单位时间中的需求量有相同的分布),因此一个周期中现有库存量期望值的变化,可以近似地看成从 $Q + k\sigma$ 线性地减少到 $k\sigma$.于是平均的期望库存量为 $\frac{Q}{2} + k\sigma$.由此可推得单位时间的平均期望保管费为

$$C_1 = cr\left(\frac{1}{2}Q + k\sigma\right).$$

(2) 订货费　只考虑固定的订货费.若记单位时间中的期望需求量为 D,此时 $D = \mu/L$,则单位时间中的期望订货次数为 D/Q.因而固定的期望订货费为

$$C_2 = \frac{D}{Q}K.$$

(3) 缺货损失费　缺货损失费可由几种不同的方式表达.

1. 基于每次缺货造成损失 B_1 的情形

由于一个周期中缺货的概率为 $P(X > s)$,因此,单位时间中缺货的期望损失费为

$$C_s = \frac{D}{Q}B_1 P(X > s).$$

因为 X 遵从 $N(\mu, \sigma^2)$,以及 $s = \mu + k\sigma$,故上式可写成

$$C_s = \frac{D}{Q}B_1\overline{\Phi}(k),$$

其中 $\overline{\Phi} = 1 - \Phi$，$\Phi$ 为 $N(0,1)$ 的分布函数.

于是，长期运行下单位时间的期望总费用为

$$G(k) = \frac{D}{Q}K + cr(\frac{1}{2}Q + k\sigma) + \frac{D}{Q}B_1\overline{\Phi}(k). \tag{4-30}$$

现在的问题为求出 k，使 $G(k)$ 达极小. 由极值必要条件，得

$$k = \left\{2\ln\frac{DB_1}{\sqrt{2\pi}\ Qcr\sigma}\right\}^{\frac{1}{2}}.$$

有了 k，就可计算 s，确定 s 的步骤为：

(1) 计算 $A_1 = DB_1/(\sqrt{2\pi}\ Qcr\sigma)$，若 $A_1 < 1$，则转到步骤③；

(2) 计算 $k = \sqrt{2\ln A_1}$，若 $k > k^*$，则转到步骤④；

(3) 取 $k = k^*$，k^* 为从管理上考虑选取的安全因子；

(4) 取 $s = \mu + k\sigma$.

例 7　$D = 1\,000$ 件/年，$Q = 200$ 件，$c = 4$ 元/件，$r = 0.1$/年，$\mu = 80$ 件，$\sigma = 20$ 件，$B_1 = 600$ 元，$k^* = 0$. 求订货点库存量 s.

解　由 $A_1 = DB_1/(\sqrt{2\pi}\ Qcr\sigma) = 149.6$，$k = \sqrt{2\ln A_1} = 3.16$. 因此，$s = \mu + k\sigma = 144$ 件.

2. 基于缺货一件其损失为 cB_2 的情形

此时单位时间缺货损失费为

$$C_s = \frac{D}{Q}cB_2E(X - s)_+.$$

由于 X 服从 $N(\mu, \sigma^2)$，故若记

$$\begin{aligned}\Psi(k) &= \frac{1}{\sigma}E(X - s)_+ \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ \sigma^2}\int_s^{\infty}(x - s)\exp(-\frac{1}{2\sigma^2}(x - \mu)^2)\mathrm{d}x \\ &= \int_k^{\infty}(x - k)\phi(x)\mathrm{d}x,\end{aligned} \tag{4-31}$$

其中 ϕ 为 $N(0,1)$ 的密度函数，则

$$C_s = \frac{D}{Q}cB_2\sigma\Psi(k).$$

于是长期运行下单位时间的期望总费用为

$$G(k) = \frac{D}{Q}K + cr(\frac{1}{2}Q + k\sigma) + \frac{D}{Q}cB_2\sigma\Psi(k). \tag{4-32}$$

与前相仿，可得 k 应满足的方程

$$\overline{\Phi}(k) = \frac{Qr}{DB_2}.$$

于是 s 的计算步骤为：

(1) 计算 $A_2 = \frac{Qr}{DB_2}$,若 $A_2 \geqslant 1$,转步骤③;

(2) 求 k,使 $\overline{\Phi}(k) = A_2$,若 $k > k^*$,转步骤①;

(3) 取 $k = k^*$;

(4) 取 $s = \mu + k\sigma$.

例 8 $B_2 = 10$ 元,其余数据同例 7,求 s.

解 $A_2 = 0.002, \overline{\Phi}(k) = 0.002$. 由标准正态分布表查得 $k = 2.88$,因而 $s = \mu + k\sigma = 137.6$ 件,取成 $s = 138$ 件.

3. 缺货费基于服务水平的情形

安全因子 k 的选取还可建立在库存系统满足需求程度(服务水平)上.

一种自然的想法是 k 的选择应基于每个订货周期中无缺货的概率 p_1 上. 此时

$$P(X > s) = 1 - p_1 = q_1.$$

由于 $P(X > s) = \overline{\Phi}(k)$,故可取安全因子 k,使 $\Phi(k) = p_1$. 订货点库存量 $s = \mu + k\sigma$.

但是,仔细分析起来上述关于 s(或 k)的决策有很大的缺点. 原因是只考虑用每个周期中不缺货的概率来做服务水平的度量,而忽视了订货周期的长度. 例如现有两种货物,甲一年订货 10 次,而乙只有 1 次. 若都要求每个订货周期中缺货的概率为 0.1,则对于货物甲,平均每年有一次缺货,而对于货物乙,平均 10 年才发生一次缺货. 按照管理上服务的含义,就不能认为这两种货物提供的服务水平是相同的. 因此,在多种货物的订货周期相差悬殊时,可以采用服务水平的其他度量来衡量.

若 k 的决策是基于需求立即得到满足的比例 p_2 上,显然,滞后供货的比例为

$$q_2 = 1 - p_2 = \frac{1}{Q}E(X - s)_+ = \frac{\sigma}{Q}\Psi(k).$$

于是确定 s 的步骤为:

(1) 求 k,使 $\Psi(k) = \frac{Q}{\sigma}q_2$,注意,$\Psi(k)$ 可写成

$$\Psi(k) = \phi(k) - k\overline{\Phi}(k),$$

其中 ϕ, Φ 分别为 $N(0,1)$ 的密度函数与分布函数,$\overline{\Phi} = 1 - \Phi$.

(2) 若 $k \geqslant k^*$,则转步骤④.

(3) 取 $k = k^*$.

(4) 取 $s = \mu + k\sigma$.

例 9 基本数据同例 7.

若 $q_2 = 0.05$,则 $k = -0.19$,此时取 $k = 0$,故 $s = 80$ 件.

若 $q_2 = 0.02$,则 $k = 0.49$,取 $s = 90$ 件.

若 $q_2 = 0.01$,则 $k = 0.90$,取 $s = 99$ 件.

这个例子表明,当缺货损失费不易估计时,由服务水平的某个要求亦可求出相应的安全库存量或订货点的库存量.

需要指出的是,大量的模拟试验表明,在上述诸模型中,若供货滞后时间中的

需求量 X 遵从正态分布这一结论是由实际数据的统计分析得出的，并且其参数 μ，σ^2 也是统计出来的，则此时用 μ,σ^2 的估计值来代替真值计算 s 的做法不会引起 s 值的多大变化.

若本小节的模型假定中的3°换成在一个长度为 L 的时间间隔中的需求量 X 有一般分布 $F(x)$，$F(0_-)=0$，此时仍可用相仿的方法讨论上述模型，但是表达式会很复杂.

4.4.2　多种货物安全库存决策的比较

许多企业在进行多种货物的库存管理时对各种货物一律同等看待，即订货点均取为相同时间中的需求量．下面用一个简单的例子来说明，若是采用上述介绍的其他库存控制的方法，则库存系统的性能会得到很大改善.

例10　有三种货物，其订货点的库存量均是基于2个月的供应量来计算的．其数据如表4-1所示.

表4-1

货物	需求量 D/(件/年)	单价 c/(元/件)	滞后时间 L/月	标准差 σ_L/件	目前订货量 Q/件	目前订货点 s/件
1	15 000	20	1.5	150	7 500	2 000
2	6 000	10	1.5	200	3 000	1 000
3	4 400	12	1.5	80	2 200	800

基于等时间需求量订货和基于每个周期有相同缺货概率的订货的情况分别如表4-2及表4-3所示．现在两种订货方式的安全库存所占用的费用相同的条件下，比较每年平均缺货总次数及缺货的总价值.

表4-2

货物	安全因子 k (1)	安全库存量的价值 S_d/元 (2)	平均每年缺货次数/(次/年) (3)	平均每年缺货总价值/(元/年) (4)
1	0.83	2 490	0.41	683.9
2	1.25	2 500	0.21	202.3
3	3.13	3 005	0	0.5
总计	/	7 995	0.62	886.7

表4-2中各栏的计算公式如下.

3类货物在滞后时间1.5个月中的需求分布分别为 $N(1\,875,150^2)$，$N(750,200^2)$，$N(550,80^2)$．下面的公式中省去下标.

(1)栏　$k=\frac{s-\mu}{\sigma}$.

(2)栏　$S_d=ck\sigma$．这里计算的是安全库存量的价值.

(3)栏　$\frac{D}{Q}P(X>s)=\frac{D}{Q}\overline{\Phi}(k)$，其中 $\frac{D}{Q}$ 为每年订货次数.

(4) 栏 $c\frac{D}{Q}E(X-s)_+ = c\frac{D}{Q}\sigma\Psi(k)$.

基于每个周期有相同缺货概率的管理方式，要求每个周期中各类货物缺货的概率相等，故应有相同的安全因子 k，因而

$$\frac{s_1 - 1\,875\text{件}}{150\text{件}} = \frac{s_2 - 750\text{件}}{200\text{件}} = \frac{s_3 - 550\text{件}}{80\text{件}} = k.$$

另一要求是，与相同间隔订货策略所需之安全库存的费用相同，即

$$(20(s_1 - 1\,875) + 10(s_2 - 750) + 12(s_3 - 550))\text{元} = 7\,995\text{元}.$$

上述两方程联立解之，可得

$$k = 1.341, s_1 = 2\,077\text{件}, s_2 = 1\,019\text{件}, s_3 = 658\text{件}.$$

表4-3中(2)～(4)栏的各量仍用前述等间隔订货中用过的公式计算.比较两种管理方式，显然后者好.

表 4-3

货物	安全因子 k (1)	安全库存量的价值 S_d/元 (2)	平均每年缺货次数/(次/年) (3)	平均每年缺货总价值/元 (4)	新的订货点 s/件 (5)
1	1.341 4	4 024	0.09	250.0	2 077
2	1.341 4	2 689	0.09	166.6	1 019
3	1.341 4	1 288	0.09	80.0	658
总计	—	8 001	0.27	496.6	—

4.4.3 (s, Q) 订货策略，s, Q 都未知

这里除 Q 未知外，其余假定与4.3.1小节的相同.下面按不同的缺货损失分别讨论 s, Q 的求法.

1. 基于每次缺货的损失费为 B_1 的情形

此时，长期运行下单位时间的期望总费用用式(4-30)计算，即

$$G(k,Q) = \frac{D}{Q}[K + B_1\overline{\Phi}(k)] + cr(\frac{1}{2}Q + k\sigma).$$

为求 k, Q，两边乘以 $\frac{2}{cr\sigma}$，得

$$H(k,Q) = \frac{2DK}{crQ\sigma}[1 + \frac{B_1}{K}\overline{\Phi}(k)] + \frac{Q}{\sigma} + 2k. \tag{4-33}$$

注意到经济订货量

$$Q^* = \sqrt{\frac{2DK}{cr}}, \tag{4-34}$$

因此，式(4-33)变为

$$H(k,Q) = \left(\frac{Q^*}{\sigma}\right)^2 \frac{\sigma}{Q}[1 + \frac{B_1}{K}\overline{\Phi}(k)] + \frac{Q}{\sigma} + 2k.$$

由极值必要条件$\frac{\partial H}{\partial Q}=0,\frac{\partial H}{\partial k}=0$,得到

$$\frac{Q}{\sigma}=\frac{Q^*}{\sigma}\sqrt{1+\frac{B_1}{k}\overline{\Phi}(k)}, \tag{4-35}$$

$$k^2=2\ln\left[\frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\frac{B_1}{K}\frac{\sigma}{Q}\left(\frac{Q^*}{\sigma}\right)^2\right]. \tag{4-36}$$

于是可得(k,Q)的一个迭代格式:

(1) 由式(4-34)求$Q_0=Q^*$;

(2) 由式(4-36)求k_0.若式(4-36)右端<0,或$k_0<k^*$,则取$k_0=k^*$,这里k^*为管理上允许的最小安全因子;否则代回式(4-35)求出Q_1,反复迭代,直到相邻的值之差满足一定的精度时计算终止.

由式(4-35)可以看出,最终得到的$Q>Q^*$,而k比由式(4-31)得到的要小.

例 11 $D=1\,220$箱/年,$c=12$元/箱,$r=0.2$/年,$K=8$元,$\mu=80$箱,$\sigma=35$箱,$B_1=320$元.试求s,Q.

解 若按4.3.1小节中的方法处理,可由EOQ公式求出Q,再由式(4-31)求出k.此时

$$Q=Q^*=\sqrt{\frac{2DK}{cr}}=90.2\text{箱},\quad k_0=\sqrt{2\ln\left(\frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\frac{B_1}{K}\frac{Q^*}{\sigma}\right)}=2.46.$$

故$s_0=\mu+k_0\sigma=166.1$箱.取$Q_0=91$箱,由式(4-30),相应的总费用为

$$G(k_0,Q_0)=453.2\text{元/年}.$$

按本节的方法,则有初值$\frac{Q}{\sigma}=\frac{Q^*}{\sigma}=2.58,k=2.46$.列出计算的表格,如表4-4所示.

表 4-4

迭代次数	0	1	2	3	4
$\frac{Q}{\sigma}$	2.58	2.91	2.96	2.97	2.97
k	2.46	2.41	2.40	2.40	2.40

于是按式(4-35),订货量$Q=103.9$箱≈104箱,订货点库存量

$$s=\mu+k\sigma=164.03\text{箱}\approx165\text{箱}.$$

总费用

$$G(k,Q)=451.0\text{元/年},$$

比用EOQ公式得出的Q^*作订货量时要节省费用2.2元/年.

从库存管理的经验与实际情况看,对那些最重要的物品,因其价格昂贵,固定订货费、保管费及缺货损失费都很大,此时可用同时优化(k,Q)的方法来计算;否则可用EOQ公式先定Q,然后再求k.

2. 基于每缺货一件其损失为cB_2的情形

此时由式(4-32),单位时间的期望总费用为

$$G(k,Q) = \frac{D}{Q}(K + c\sigma B_2\Psi(k)) + cr(\frac{Q}{2} + k\sigma). \tag{4-37}$$

与前面的处理相仿,两边乘以$\frac{2}{cr\sigma}$,得

$$H(k,Q) = \left(\frac{Q^*}{\sigma}\right)^2\frac{\sigma}{Q}\left(1 + \alpha\sigma\frac{B_2}{K}\Psi(k)\right) + \frac{Q}{\sigma} + 2k.$$

由 $\partial H/\partial k = 0, \partial H/\partial Q = 0$,得

$$\bar{\Phi}(k) = 2\left((Q^*)^2\frac{c}{Q}\frac{B_2}{K}\right)^{-1}, \tag{4-38}$$

$$Q = (Q^*)\sqrt{1 + \alpha\sigma\frac{B_2}{K}\Psi(k)}. \tag{4-39}$$

若取初值 $Q_0 = Q^*$,由式(4-38)求出 k,再代回式(4-39)求出 Q.这样便得一个迭代求解的方法.迭代中要注意的一点是,当 $k \leqslant 0$ 或 $k < k^*$ 时应取 $k = k^*$.

例 12 基本数据同例 11,$B_2 = 10$,求(s,Q).

解 若只对 k 的值优化,而 Q 的值由 EOQ 公式求得,则由式(4-34),订货量 $Q = Q^* = 91$ 箱.由式(4-38),得 $k = 2.97$,因此订货点

$$s = \mu + k\sigma = 185 \text{ 箱}.$$

若同时对 k,Q 进行优化,则由式(4-38)及式(4-39),迭代两步后有 $k = 3.09$,$Q = 97$ 箱.因而 $s = \mu + k\sigma = 189$ 箱.事实上,与仅用 EOQ 公式来确定 Q 相差不大.

5 多品种多级库存系统的控制

5.1 多品种多级库存问题

多品种多级库存系统可用图 5-1 形象地表示.在这种系统中,最高的第一级是货源点(中心仓库),它供应第二级的库存点.依此下去,最低的一级库存点(如零售店)直接满足顾客的需求.货源点直接从外界订货或组织生产.若在图 5-1 中第一级有多于一个货源点,则系统是更复杂的多货源多级库存系统.

多品种多级库存系统的一个特点是,可能有多种不同的订货策略:单个货物分别订货;联合订货,即同时订购所有物品;混合策略,它是上述两种方式的混合,允许同时订购所有或部分货物.相应于这三种订货策略,每次订货的固定费用对最优策略有显著影响.以两种货物为例,一次单独订购货物 i 的固定费用为 K_i,联合订购时为 K,一般应有

$$\max(K_1, K_2) \leqslant K \leqslant K_1 + K_2. \tag{5-1}$$

问题的复杂性还表现在如下几个方面.

(1) 需求过程的复杂性 由于整个过程具有一种层次结构,因此,与不同的库

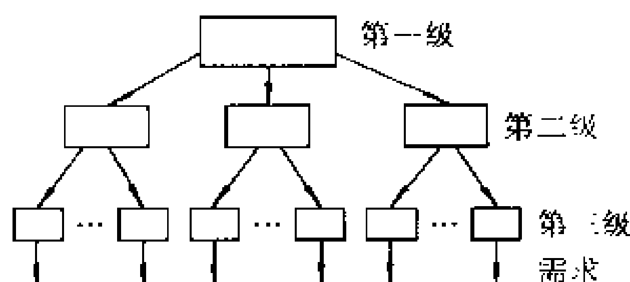


图 5-1

存(或生产)策略结合起来的需求过程是复杂的过程的迭加,特别在需求是随机的情况下.

(2) 决策变量优化的复杂性　决策变量需要从系统的角度同时优化.

(3) 多级情况下服务水平度量的复杂性　通常,服务水平只在最低一级上来度量.较高一级上的缺货只对服务有次要影响,即它可能增加对下一级的供货滞后时间,当然最终会影响服务质量.显然,某一级上的安全库存量会影响另一级上的缺货情况.多级问题必须从总体上考虑,避免过多的安全库存量.

(4) 缺货处理的复杂性　由于多级结构本身的复杂性,当缺货出现时,可采用的处理方式会多种多样.例如,一个下级的仓库向中心仓库发出订货量为 Q 的一份订单时,若中心仓库的现存库存量小于 Q,则是马上发送库存部分还是等货备齐后一起发送?从中心仓库向零售店紧急发货是否可能?同一级之间能否互相调剂?当最高一级面对几个不同地点的要求不能全部满足时,是采取配给策略还是其他方法来处理?这些因素都会使得对多级系统进行优化时更加复杂化.

(5) 计算的复杂性　无论是用多级多变量的动态规划来计算,还是采用评定有限个不同的系统策略的优劣,甚至仅做一些近似的启发式计算,其计算量都是非常大的.

(6) 组织实施中的问题复杂性　管理一个多级系统需要信息的收集与处理,需要协调各项活动.但是,局部利益常妨碍系统的成功实施.这是实际执行中的最大障碍.

下面讨论最简单的模型.

5.2　两种货物的确定性模型

下面简单介绍在不同的订货策略下两种货物的库存模型.

5.2.1　两种货物单独订货模型

模型的假定与2.1节中的基本模型相同.用下标 i 表示第 i 种货物,于是相邻最佳订货间隔 t_i^* 和经济订货量 Q_i^* 分别为

$$t_i^* = \sqrt{\frac{2K_i}{c_i r_i D_i}},$$

$$Q_i^* = \sqrt{\frac{2D_iK_i}{c_ir_i}} \qquad (i = 1,2).$$

总费用为

$$(TC)_I^* = \sum_{i=1}^{2}(c_iD_i + \sqrt{2c_ir_iD_iK_i}).$$

5.2.2　两种货物联合订货模型

用 t 记联合订货的时间间隔，K 为一次联合订货所需固定费用，则总费用为

$$(TC)_J^* = \frac{K}{t} + \sum_{i=1}^{2}c_iD_i(1 + \frac{1}{2}r_it).$$

由此，最佳订货间隔为

$$t^* = \sqrt{\frac{2K}{\sum_{i=1}^{2}c_ir_iD_i}},$$

经济订货量

$$Q_i^* = D_it^* \qquad (i = 1,2),$$

最小总费用为

$$(TC)_J^* = \sum_{i=1}^{2}c_iD_i + \sqrt{2K\sum_{i=1}^{2}c_ir_iD_i}.$$

上述两种订货策略谁优谁劣呢？这只要比较 $(TC)_I^*$ 与 $(TC)_J^*$ 的大小即可知．为此，记

$$\lambda_i = \sqrt{\frac{K_i}{K}\frac{c_ir_iD_i}{\sum_{i=1}^{2}c_ir_iD_i}} \qquad (i = 1,2).$$

于是，有

$$(TC)_J^* < (TC)_I^*，当且仅当\ \lambda_1 + \lambda_2 > 1.$$

这表明：

当 $\lambda_1 + \lambda_2 > 1$ 时，联合订货的总费用小；

当 $\lambda_1 + \lambda_2 < 1$ 时，单独订货的总费用小；

当 $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$ 时，两种订货的总费用相同．

显然，当 $K_1 = K_2 = K$ 时，总有 $\lambda_1 + \lambda_2 > 1$，故联合订货时费用小．

5.2.3　两种货物的混合订货策略

在这个模型中缺货是不允许的，订货采用混合订货策略，满足式(5-1)．此种策略在某一时刻允许同时订货，有时也允许单个订货．最简单的混合订货策略是：只允许某一种货物单独订货，如图 5-2 所示．

这里只对两种货物的库存系统进行讨论．为了叙述方便，称有较长订货间隔的货物为主产品，另一产品称为附属产品．

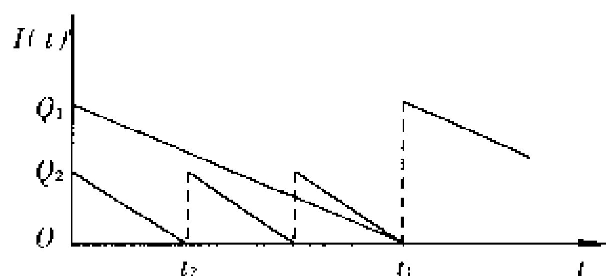


图 5-2

沿用相同的记号，假定货物1是主产品，2是附属产品，则

$$Q_1 = D_1 t_1,\quad Q_2 = D_2 t_2,\quad t_1 = n t_2, \tag{5-2}$$

其中 $n(n \geqslant 2)$ 为在货物1的相邻订货间隔 t_1 中，产品2的订货次数．若在时刻0时有一次联合的订货，则 t_1 为联合订货时刻，而在 $(0, t_1)$ 中有 $n-1$ 次货物2的单独订货．因此，总的平均费用为

$$(\mathrm{TC}) = c_1 D_1 + c_2 D_2 + \frac{K + (n-1)K_2}{t_1} + \frac{1}{2} c_1 r_1 Q_1 t_1 + \frac{1}{2} c_2 r_2 Q_2 t_2. \tag{5-3}$$

由式(5-2)可知，(TC)是 (n, t_2) 的函数．固定 n，由 $\partial(\mathrm{TC})/\partial t_2 = 0$，可解出

$$t_2 = \sqrt{\frac{2(K + (n-1)K_2)}{n(nc_1 r_1 D_1 + c_2 r_2 D_2)}}. \tag{5-4}$$

把上式代回式(5-3)，表成 n 的函数，得

$$F(n) = c_1 D_1 + c_2 D_2 + \sqrt{2(K - K_2 + nK_2)\left(c_1 r_1 D_1 + \frac{1}{n} c_2 r_2 D_2\right)}. \tag{5-5}$$

令 n^* 是使式(5-5)达极小的值．若货物1是主产品，则必存在 $n^* \geqslant 2$．因此，混合订货策略至少要与同时订货策略一样好，故

$$F(n^*) \leqslant F(1).$$

由式(5-5)，上式可表成

$$\frac{n^* - 1}{n^*}(-Kc_2 r_2 D_2 + K_2 c_2 r_2 D_2 + n^* K_2 c_1 r_1 D_1) \leqslant 0.$$

由于 $n^* \geqslant 2$，故必有

$$n^* \leqslant \frac{(K - K_2) c_2 r_2 D_2}{K_2 c_1 r_1 D_1}. \tag{5-6}$$

因此，若1是主产品，则应有

$$2 \leqslant n^* \leqslant \frac{K - K_2}{K_2} \frac{c_2 r_2 D_2}{c_1 r_1 D_1}. \tag{5-7}$$

可以证明，若1是主产品，则2不会是主产品，否则会与式(5-1)矛盾．这表明产品1与2不能同时为主产品．因此，如果有主产品的话，则不等式(5-7)可用来判明哪个产品是主产品，若式(5-7)不成立，则或者产品2是主产品，或者无主产品，对于后者，则采用联合订货策略．

n^* 由式(5-5)求出．显然 n^* 满足

$$F(n^*) \leqslant F(n^* - 1),\quad F(n^*) \leqslant F(n^* + 1).$$

具体来说，n^* 满足

$$n^*(n^* - 1) \leqslant \frac{K - K_2}{K_2} \frac{c_2 r_2 D_2}{c_1 r_1 D_1} \leqslant n^*(n^* + 1). \tag{5-8}$$

例1　两种货物的基本数据如表5-1所示．

表 5-1

货物	单价 c/元	K/元	需求量 D/(件/年)	r/(元/年)
1	1 500	100	50	0.02
2	1 000	80	280	0.04

采用联合订货时,固定订货费 $K = 140$ 元.试讨论这两种货物的订货策略.

解　先确定主产品.因为

$$\frac{K-K_2}{K_2}\frac{c_2r_2D_2}{c_1r_1D_1} = \frac{140-80}{80}\frac{1\,500\times0.02\times50}{1\,000\times0.04\times280} = 0.1 < 2,$$

$$\frac{K-K_1}{K_1}\frac{c_1r_1D_1}{c_2r_2D_2} = \frac{140-100}{100}\frac{1\,000\times0.04\times280}{1\,500\times0.02\times50} = 2.98 > 2,$$

故 2 是主产品,n^* 应满足

$$n^*(n^*-1) \leqslant \frac{K-K_1}{K_1}\frac{c_1r_1D_1}{c_2r_2D_2} = 2.98 \leqslant n^*(n^*+1),$$

故 $n^* = 2$.由与式(5-4)相仿的公式,得

$$t_1^* = \sqrt{\frac{2(K+(n^*-1)K_1)}{n^*(n^*c_2r_2D_2+c_1r_1D_1)}} = 0.10\text{ 年} = 36\text{ 天}.$$

而

$$t_2^* = 2t_1^* = 72\text{ 天}.$$

最佳订货量为

$$Q_1^* = D_1t_1^* = 5\text{ 件},$$
$$Q_2^* = D_2t_2^* = 57\text{ 件}.$$

6　库存控制的实践

本章介绍库存分析及控制较为实用的技术.

6.1　库存系统的 ABC 分类法

在库存系统的控制中,有许多应该控制的因素,其中只有少数是重要的,但这些少数因素的影响却是很大的.在实际中经常会发现 20% 左右的货物其占用的金额(需求量乘以单价)为总金额的 80% 左右,而其余 80% 左右的货物只占用总金额的 20% 左右.称这些重要的货物为 A 类货物.此外,称占用的金额较少,约占用总金额的 15% 左右的货物为 B 类货物,称只占用非常少的金额(如占总金额的 3% ~ 5%)的货物为 C 类货物.

针对上述三类货物,实用上可分别采用不同的订货策略.

根据经验，对于 A 类货物，应予以特别注意．例如每月检查其库存订货水平及采购费用，建议用经济订货量 EOQ 公式确定订货量．对于 B 类货物，其种类数约占货物总类的20% ~ 30%，但金额约占15%，建议每6个月检查其库存水平及确定其订货量．对于 C 类货物，其种类数约占货物总类的50% ~ 60%，但只占5%左右的总金额，一般可以按年度检查其库存量，每年进货一次；在大多数情形下可以只用一个简单的订货策略，而不必去单独考虑每个货物的订货．

下面用一个例子来说明具体如何应用这种思想．

例1　某企业对16种货物的需求及单价如表6-1所示．每次固定的订货费为40元．一个单位价格的货物在单位时间中的库存费 $r = 0.40$ 元／年．由表6-1所示的数据，可把货物1,2看成 A 类，货物3,4,5看成 B 类，货物6 ~ 16看成 C 类．

在表6-2中列出了用 EOQ 公式算出的最佳订货量 Q^* 及每年的订货次数 N．

由表6-2知，按 EOQ 公式，对于货物1，每隔0.3月订货一次，每次订货量为50件，每年订货40次．而对于货物16，每隔24月订货一次．由此可见 A，C 类货物之间的差异．一般地，A 类货物若不采用 EOQ 公式来确定订货量，则其损失比 C 类货物不采用 EOQ 公式来确定订货量要大得多．

表6-1

货物	需求量 D/(件／年)	单价 c/(元／件)	cD/元	
1	2 000	160	320 000	占79%，A
2	1 600	60	96 000	
3	150	400	60 000	占18%，B
4	500	50	25 000	
5	5 000	2	10 000	
6	300	20	6 000	占3%，C
7	100	30	3 000	
8	120	20	2 400	
9	1 500	1	1 500	
10	30	30	900	
11	500	1	500	
12	100	2	200	
13	10	20	200	
14	10	15	150	
15	6	10	60	
16	10	5	50	
			525 960 元	

从管理的角度来讲，C 类货物可以归并在一起订货．假定货物6 ~ 10采用每隔6个月订货一次，货物11 ~ 16每年订货一次，表6-3列出了相应的结果．

表6-2

	D/(件/年)	c/(元/件)	cd/元	Q^*/件	cQ^*/元	月	N/(次/年)
1	2 000	160	320 000	50	8 000	0.3	40.0
2	1 600	60	96 000	74	4 440	0.6	21.6
3	150	400	60 000	9	3 600	0.7	16.7
4	500	50	25 000	45	2 250	1.1	11.1
5	5 000	2	10 000	708	1 416	1.7	7.1
6	300	20	6 000	55	1 100	2.2	5.5
7	100	30	3 000	26	780	3.1	3.8
8	120	20	2 400	35	700	3.5	3.4
9	1 500	1	1 500	548	548	4.4	2.7
10	30	30	900	15	450	6.0	2.0
11	500	1	500	317	317	7.6	1.6
12	100	2	200	100	200	12.0	1.0
13	10	20	200	10	200	12.0	1.0
14	10	15	150	12	180	14.4	0.8
15	6	10	60	11	110	22.0	0.5
16	10	5	50	20	100	24.0	0.5
							119.3

表6-3

货物	最优EOQ策略		联合订货策略	
	N/次	cQ^*/元	N/次	cQ/元
6	5.5	1 100	2	3 000
7	3.8	780	2	1 500
8	3.4	700	2	1 200
9	2.7	548	2	750
10	2.0	450	2	450
11	1.6	317	1	500
12	1.0	200	1	100
13	1.0	200	1	200
14	0.8	180	1	150
15	0.5	110	1	60
16	0.5	100	1	50
	22.8	4 685	16	7 960

对于货物6～16,当采用EOQ公式时,有22.8次订货,因此固定订货费为

$$C_1 = 40 \times 22.8\ 元 = 912\ 元,$$

平均的库存费为

$$C_2 = \frac{1}{2} rcQ = \frac{1}{2} \times 0.4 \times 4\,685\ 元 = 937\ 元.$$

总费用为

$$(TC) = (912 + 937)\ 元 = 1\,849\ 元.$$

而联合订货时的总费用为

$$(TC)_J = (40 \times 16 + \frac{1}{2} \times 0.4 \times 7\,960)\ 元 = 2\,232\ 元.$$

比最优EOQ公式要多支出383元,增加费用20.7%.

初看起来最优EOQ公式给出的结果似乎要好.但是,仔细分析后可发现,若考虑到管理上的因素,如联合订货时若可以用一份订单在同一供应商处订多个品种的货物,则固定的订货费会大大地减小.此外,联合订货也减少了管理上的费用.此外,过长的订货间隔可能不适应市场的变化,一旦产品需要改型,那么旧的存货就可能不适用.这种情形也会造成额外的损失.因此,从经营管理上来讲,联合订货策略可能更有利些.

但是,对于重要的A类货物,若采用每月订货一次,则与最佳策略相比,费用的增加就会很大,如表6-4所示.

表6-4

货物	最优EOQ策略		联合订货策略	
	N/次	cQ^*/元	N/次	cQ/元
1	40.0	8 000	12	26 720
2	21.6	4 400	12	8 040
	61.6	12 400	24	34 760

最优EOQ策略下,A类货物的总费用为

$$(TC) = (40 \times 61.6 + \frac{1}{2} \times 0.4 \times 12\,400)\ 元 = 4\,944\ 元,$$

采用联合订货时的总费用为

$$(TC)_J = (40 \times 24 + \frac{1}{2} \times 0.4 \times 34\,760)\ 元 = 7\,912\ 元,$$

后者比前者多支出2968元,增加费用60%.

由于A类货物的数目很少,采用联合订货减少固定订货费的可能性较小.因此,对于A类货物,应尽量采用EOQ公式确定订货量.

6.2　确定性库存问题的总体考虑

在库存模型的实际执行中,有时费用结构中的许多参数很难估计.然而,对企业或工厂的高层决策中的一些定量因素的考虑,能帮助对这些参数作出合适的选

择.通常这些因素有：

(1) 平均总库存占用的资金应在某个数以下；

(2) 在单位时间(如一年)中,订货的总次数,亦即订货的总固定费用应控制在某个数字以下.

一般地,总库存量增大,必然会使单位时间中的订货次数减少;反之,总库存量减少,订货次数必然增加.因此,系统应在平均库存及单位时间的总订货次数之间的某个折衷方案上运行.

假定现在考虑 n 种货物的库存问题,认为所有货物的固定订货费相近,均设为 K;而单位价格的货物在单位时间中的保管费为 r,对所有货物也看作是一样的.

对于确定性基本模型,记货物 i 由 EOQ公式确定的订货量为 Q_i,则单位时间中平均总库存占用的资金为

$$(\mathrm{TC}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} c_i Q_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{K}{r}} \sum_{i=1}^{n} \sqrt{c_i D_i}, \tag{6-1}$$

单位时间的订货总数

$$N = \sum_{i=1}^{n} \frac{D_i}{Q_i} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{r}{K}} \sum_{i=1}^{n} \sqrt{c_i D_i}. \tag{6-2}$$

由此

$$(\mathrm{TC})N = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} \sqrt{c_i D_i}\right)^2 = 常数. \tag{6-3}$$

因而在(N,TC)坐标系中,上述方程式(6-3)的曲线相应于一条双曲线(图6-1).因

$$\frac{\mathrm{TC}}{N} = \frac{K}{r}, \tag{6-4}$$

故在双曲线上的任意一点都对应于一个相同的 K/r 的值.当 K 或 r 中的某一个已知时,就可由此求得另一个的值.

此外,由这条双曲线能看出库存系统总体性状的变化与改善.对高层决策者来讲,这比对单个货物使用 EOQ 公式使其总费用最小更有吸引力.

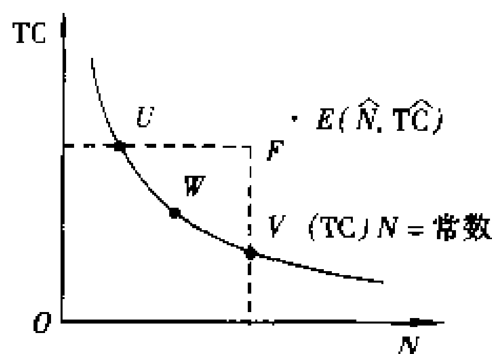


图 6-1

例 2　数据同例 1.由式(6-4),得

$$\frac{\mathrm{TC}}{N} = \frac{K}{r} = 100.$$

由表 6-2 可知,总的订货次数 $N = 119.3$ 次.因此由式(6-4),(TC) = 11 930 元.在(N,TC)坐标系中画出的双曲线(图 6-1),

$$(\mathrm{TC})N = (1\ 193)^2 = 1\ 423\ 249 = 常数.$$

假定在这个库存系统中,根据已有数据估计出来的单位时间总订货次数为 $\widehat{N}$,平均总库存占用的资金为$\widehat{\mathrm{TC}}$,在图 6-1 中用 E 点的坐标表示.为了改进库存系统的性状,总经济师可以提出要求,其指标用 F 表示.显然,系统若以 F 点的指标运行,

则总订货次数及占用资金都比估计的情形要好.但是,由上述分析可知,系统可按双曲线 UV 上的任一点上的指标运行,其相应的(N,TC)值都比 F 点的要小.若进一步通过经营管理上的分析,认为 W 点相应的(N,TC)值比较合适,则 W 点的 N 就可以作为订货总次数的决策值.这样确定的 N 未必是最优的,但它能与TC取得某种折衷,满足管理上的需求.

参 考 文 献

1　Silver E A, Peterson R. Decision systems for inventory management and production planning. 2nd ed. New York: Wiley, 1985.

2　Sivazlion. B. D., Stanfel L. E. Analysis of systems in operations research. New Jersey: Prentice-Hall, 1975.

3　Ross S M. Stochastic processes. New York: Wiley, 1983.

·随机数学卷·

第17篇

马尔可夫决策过程

编　者　林元烈
审校者　伍从斌

目　录

引　　言

人类在征服自然改造社会的实践中,最具魅力的莫过于人能对某些系统作出一系列决策,以控制(或影响)系统未来的发展.马尔可夫(A.A.Markov)决策过程(Markov desision processes,简记为 MDP)就是研究可控随机动态系统序贯决策优化问题而迅速发展起来的一门年轻学科.为掌握与控制随机动态系统,决策者必须在一系列(离散或连续的)观察时刻,依据当时的状态,从系统可用的行动(措施、方案或参数等)集合中选取其一(即作出决策),从而将获得一定的效益(或性能指标等),同时,系统下一时刻的转移概率已知,且它与以往的历史无关(即具有某种马尔可夫性).决策者要依据下一次观察到的状态,即得到新的信息后,再作下一步新的决策.这种序贯决策(即策略)与系统状态转移规律相互作用决定了系统的发展进程.选用策略的目的在于控制系统的全过程,以达到某种意义下的最优化.

MDP 起源于 20 世纪 50 年代贝尔曼(R.E.Bellman)与沙普利(L.S.Shapley)的工作,20 世纪 60 年代霍华德(R.A.Howard)、布列克威尔(D.Blackwell)等人的工作为它奠定了理论基础,至今已形成为概率统计与运筹学相交叉的新分支.它在存储销售、更换维修、排队系统、可靠性工程、水库调度及管理等领域已有成功的应用,近十多年又在许多高科技、金融投资风险等新领域显示威力!

1　基 本 概 念

1.1　离散时间 MDP 模型

一个离散时间 MDP 模型一般由(S,A,q,r)四个要素组成.

(1)**状态空间** S　指系统所有可能状态(非空)集.

(2)**行动集** A　指状态 $i(i\in S)$可用行动集

$$A=\bigcup_{i\in S}A(i)\qquad(\text{非空}).$$

又称

$$K=\{(i,a)\mid i\in S,a\in A(i)\}$$

为允许的状态-行动对构成之集.

(3) 系统状态的转移律族 q　$q=\{q(j\mid i,a),i,j\in S,a\in A\}$.其中 $q(j\mid i,a)$ 为在任一时刻 $t(t=0,1,2,\cdots)$,系统处于状态 i,采用行动 a 的条件下,于时刻 $t+1$ 到状态 j 的转移概率,它与系统在 t 时刻以前的历史无关(即具有马尔可夫性)且与时刻 t 无关(时齐性).q 具有如下性质:

$$\begin{cases} q(j \mid i,a) \geqslant 0 & (j \in S), \\ \sum_{j\in S} q(j \mid i,a) = 1 & (i \in S, a \in A(i)), \end{cases}$$

即 q 是参数为 a 的时齐的**马尔可夫转移律**族.

(4) **报酬函数** r　记 $r(i,a)$ 为系统在任一 t 时刻在状态 i 选用行动 a 的一步报酬,r 是从 K 到 $\mathbf{R}$ = {全体实数} 的函数.

为便于理解,本章 1.2 节 ~ 1.6 节假设 S 和 A 均为可数集.

1.2　策　　略

1.2.1　决策函数

定义 1　设 f 是从 S 到 A 的函数,即

$$f: S \to A.$$

若对于每一状态 $i \in S$,有对应选用的行动 $f(i) \in A(i)$,则称 f 为确定性决策规则,或称为**决策函数**.

决策函数之集记为 $F = \{f \mid f: S \to A\}$.

1.2.2　确定性马氏策略

定义 2　称 $\pi = \{f_0, f_1, f_2, \cdots, f_t, \cdots\}(f_t \in F, t = 0,1,2,\cdots)$ 为**确定性马氏策略**,其中 $f_t \in F$ 表示 t 时刻选用的决策函数(规则).

全体确定性马氏策略之集记为 Π_m^d.

1.2.3　确定性平稳策略

定义 3　设 $\pi = \{f_t, t \geqslant 0\} \in \Pi_m^d$,若其中 $f_t = f$ 与 t 无关,则称 $\pi = \{f_t, t \geqslant 0\} = f^\infty$ 为**确定性平稳策略**.

全体确定性平稳策略之集记为 Π_s^d. 可将 $\{f, f, \cdots\}$ 简记为 f(或 f^∞),换句话说,可将 F 等同于 Π_s^d.

1.2.4　随机策略

定义 4　称 $h_t = (i_0, a_0, i_1, a_1, \cdots, i_t) = (k_0, k_1, k_2, \cdots, k_{t-1}, i_t)$ 为系统直到时刻 t 的一个历史. 其中 $i_n \in S, a_n \in A(i_n), k_n \in K, 0 \leqslant n < t, i_t \in S$. 记 $H_0 = S$, $H_t = K^t \cdot S = \{h_t\}$, 则称 H_t 为系统直到时刻 t 的历史集.

定义 5　称 $\pi = (\pi_t, t \geqslant 0) = (\pi_0, \pi_1, \pi_2, \cdots)$ 为**随机策略**,其中 $\pi_t = \pi_t(\cdot \mid h_t)$ 是在给定历史 h_t 时定义在 $A(i_t)$ 上的概率分布,即 $\pi_t(A(i_t) \mid h_t) = 1$, $\pi_t(a \mid h_t)$ 表示在历史 h_t 下,t 时刻选用行动 a 的概率. 因此,策略 $\pi = (\pi_t, t \geqslant 0)$ 是一串决策序列,它规定了在系统运行历史为 h_t 的情况下,决策者在时刻 t 应选用行动 a 的概率 $(a \in A(i_t))$.

记 $\Pi = \{\pi\}$ 为全体策略之集.

对于 $\pi = (\pi_t, t \geqslant 0) \in \Pi$,若 $\pi_t(\cdot \mid h_t)$ 为退化分布,即存在从 H_t 到 $A(i_t)$ 的函数 $f_t(h_t) \in A(i_t)$ 满足

$$\pi_t(f_t(h_t) \mid h_t) = 1 \qquad (\forall\, h_t \in H_t, t \geqslant 0),$$

则称 $\Pi = (f_0, f_1, f_2, \cdots, f_t, \cdots)$ 为**确定性策略**,其全体记为 Π^d.

1.2.5 马氏策略类与平稳策略类

定义 6 若 $\pi = (\pi_t, t \geqslant 0) \in \Pi$ 中 π_t 与历史无关,即 $\forall\, h_t \in H_t, i_t \in S, a \in A(i_t)$,

$$\pi_t(a \mid h_t) = \pi_t(a \mid i_t),$$

则称 π 为马氏策略.其全体所成之集记作 Π_m,称它为马氏策略类.

若 $\pi \in \Pi_m$,且 $\pi_t = \pi_0, \forall\, t \geqslant 0$,则称 π 为**平稳策略**.其全体所成之集记为 Π_s,称 Π_s 为平稳策略类.

1.2.6 策略类的关系

策略类有如下关系:

$$\Pi_s^d \subset \Pi_m^d \subset \Pi_m \subset \Pi; \quad \Pi_s^d \subset \Pi_s \subset \Pi_m.$$

1.3 马尔可夫决策过程

记 X_t 及 Δ_t 分别表示在时刻 t 系统的状态及选用的行动.由于状态转移是随机的,选用的行动也是随机的.这样对于固定的 $t \geqslant 0$, X_t 及 Δ_t 是二维随机变量.因此 $\{(X_t, \Delta_t), t \geqslant 0\}$ 为一离散参数的随机过程.显而易见,这种随机过程的概率特性依赖于所用的策略.当用策略 $\pi \in \Pi$ 时,所对应的随机过程记为

$$Z(\pi) = \{(X_t, \Delta_t), t \geqslant 0\}.$$

1.3.1 定义

定义 7 称 $Z(\pi) = \{(X_t, \Delta_t), t \geqslant 0\}$ 为由策略 π 产生的**马尔可夫决策过程**.(简称马氏决策过程).称 $\{R_t(\pi) \xlongequal{\text{def}} R_t = r(X_t, \Delta_t), t \geqslant 0\}$ 为由 π 产生的**报酬过程**.在给定 $\pi \in \Pi$ 时,简记为 $\{R_t, t \geqslant 0\}$.

1.3.2 MDP 的概率空间注解

记 $\Omega = (SA)^\infty = SASA\cdots$. $\mathscr{F}$ 为其上相应的 σ 代数.这里 Ω 的元素 $\omega = \{(i_t, a_t) t \geqslant 0\}$, $i_t \in S$, $a_t \in A$, $t \geqslant 0$.可以证明,若给定 X_0 的初始分布及策略 $\pi \in \Pi$,则在可测空间$(\Omega, \mathscr{F})$上存在唯一的概率测度 P^π.称$(\Omega, \mathscr{F}, P^\pi)$为由 π 产生的概率(测度)空间.这里,

$$\begin{aligned}&P^\pi(X_0 = i_0, \Delta_0 = a_0, X_1 = i_1, \Delta_1 = a_1, \cdots)\\ &= P(X_0 = i_0)\pi_0(a_0 \mid i_0) q(i_1 \mid i_0, a_0) \pi_1(a_1 \mid i_0, a_0, i_1) \cdots\end{aligned}$$

因此,1.3.1 小节中的 $Z(\pi)$ 由 $S, A, q, \pi \in \Pi$ 及 X_0 的初始分布唯一确定.

1.3.3 $Z(\pi)$ 的性质

1° 若 $\pi \in \Pi_m$，则对应的 $Z(\pi) = \{(X_t,\Delta_t), t \geq 0\}$ 为一非时齐马尔可夫链.

2° 若 $\pi = (\pi_0,\pi_1,\cdots) \in \Pi_s$，则对应的 $Z(\pi) = \{(X_t,\Delta_t), t \geq 0\}$ 是一时齐马氏链，其一步转移概率为

$$P^{\pi}(X_{t+1} = j, \Delta_{t+1} = b \mid X_t = i, \Delta_t = a) = q(j \mid i,a)\pi_0(b \mid j).$$

3° 若 $\pi = f^{\infty} \in \Pi_s^d$，则对应的 $Z(\pi) = \{(X_t,\Delta_t), t \geq 0\}$ 为一时齐马氏链，其一步转移概率为

$$P^{f^{\infty}}(X_{t+1} = j, \Delta_{t+1} = f(j) \mid X_t = i, \Delta_t = f(i)) = q(j \mid i, f(i)) \quad (i,j \in S, t \geq 0).$$

1.4 准 则

在引入 MDP 的基本要素 (S,A,q,r) 及决策者对系统所有可能采用的策略集 Π 后，为反映决策者决策控制的主要目的与意愿，需要引入某些决策准则（性能指标或目标函数），以便能够度量在给定的策略下，系统的性能或经济效益的优劣.

目前常用的准则有以下几种.

1.4.1 有限阶段期望总报酬准则

给定正整数 n，设策略 $\pi \in \Pi$ 及 $i \in S$，称

$$V_n(\pi,i) = E^{\pi}\Big(\sum_{t=0}^{n} R_t \mid X_0 = i\Big) = E^{\pi}\Big(\sum_{t=0}^{n} r(X_t,\Delta_t) \mid X_0 = i\Big) \tag{1-1}$$

为**有限阶段期望总报酬**.其中 E^{π} 表示对 P^{π} 求数学期望，P^{π} 是对应 π 产生的概率测度. $V_n(\pi,i)$ 的直观意义是采用策略 π、在 $t=0$ 时，系统从 i 出发的条件下，到第 n 阶段决策者获得的期望（总）报酬.记

$$\boldsymbol{V}_n(\pi) = (V_n(\pi,i), i \in S)^{\mathrm{T}}$$

为其列向量，则称 $(S,A,q,r,\boldsymbol{V}_n)$ 为**有限阶段模型**.其中 $\boldsymbol{V}_n$ 由式(1-1)定义.

1.4.2 折扣期望总报酬准则

对于给定的 $\beta(0 < \beta < 1)$，设策略 $\pi \in \Pi$ 及 $i \in S$，则称

$$V_{\beta}(\pi,i) = E^{\pi}\Big(\sum_{t=0}^{\infty} \beta^t R_t \mid Z_0 = i\Big) \tag{1-2}$$

为用策略 π，在0时刻从 i 出发的条件下的**折扣期望总报酬**.其中 β 是折扣因子，相当于把 t 时段的单位报酬折合成0时段时的值，其值为 β^t.这反映决策者既侧重于近期效益，又兼顾长远效益的意愿，同时也为理论研究带来许多方便.记

$$\boldsymbol{V}(\pi) = (V_{\beta}(\pi,i), i \in S)^{\mathrm{T}},$$

则称 $(S,\boldsymbol{A},q,r,\boldsymbol{V}_{\beta})$ 为**折扣准则模型**.其中 $\boldsymbol{V}_{\beta}$ 由式(1-2)定义.

1.4.3 平均准则

对于给定的 $\pi \in \Pi$ 及 $i \in S$,称

$$V_a(\pi,i) = \liminf_{n\to\infty}\left(\frac{V_n(\pi,i)}{n+1}\right) \tag{1-3}$$

为用策略 π,在0时段从 i 出发的条件下,长期运行的每单位**平均期望报酬**.记

$$\boldsymbol{V}_a(\pi) = (V_a(\pi,i), i \in S)^{\mathrm{T}},$$

则称$(S,A,q,r,\boldsymbol{V}_a)$为**平均准则模型**.其中 V_a 由式(1-3)定义.在式(1-3)中取下极限$(\liminf_{n\to\infty})\left(\liminf_{n\to\infty} a_n \xlongequal{\text{def}} \sup_{n\geq 1}(\inf_{k\geq n} a_k)\right)$ 是为保证该式总有意义.自然,式中也可定义为取上极限.

1.4.4 概率准则

给定策略 $\pi \in \Pi, i \in S$ 及目标值 $x \in \mathbf{R} = (-\infty, +\infty)$,称

$$B_n = B_n(\pi) = \sum_{t=1}^{n} \beta^{t-1} R_t$$

为 n 时段折扣总报酬.其中 $\beta \in (0,\beta_0)$ 为折扣因子,$\beta_0 > 0$,称

$$F_n(i,x,\pi) = P^{\pi}(B_n(\pi) \leq x \mid Z_1 = i) \tag{1-4}$$

为采用策略 π,在1时刻从 i 出发的条件下,n 时段折扣总报酬未超过目标值 x 的概率.记

$$\boldsymbol{F}_n(x,\pi) = (F_n(i,x,\pi), i \in S)^{\mathrm{T}},$$

则称$(S,A,q,r,\boldsymbol{F}_n)$为有限时段**概率准则模型**.

概率准则具体形式有许多种.以上仅举最基本的一种,它们在金融经济及工程技术的风险分析中有广泛的应用.

1.5 最优策略

1.5.1 折扣准则最优策略

设二向量 $\boldsymbol{V} = (V(i), i \in S)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{V}' = (V'(i), i \in S)^{\mathrm{T}}$,若 $\forall i \in S$,均有 $V(i) \geq V'(i)$,则记 $\boldsymbol{V} \geq \boldsymbol{V}'$;若 $\boldsymbol{V} \geq \boldsymbol{V}'$ 且 $\boldsymbol{V} \neq \boldsymbol{V}'$ 则记作 $\boldsymbol{V} > \boldsymbol{V}'$.记 $\boldsymbol{e} = (1,1,\cdots,1\cdots)^{\mathrm{T}}$ 为单位向量.

定义8 对于给定的非负实数 ε,一个策略 $\pi^* \in \Pi$,若对于所有 $\pi \in \Pi$,均有

$$V_\beta(\pi^*) \geq V_\beta(\pi) - \varepsilon \boldsymbol{e},$$

则称 π^* 为关于折扣准则 **ε 最优策略**;当 $\varepsilon = 0$ 时,则称 π^* 为关于折扣准则**最优策略**,称 $V_\beta(\pi^*) \xlongequal{\text{def}} V_\beta^*$ 为**最优值函数**.

对于有限阶段准则及平均准则,可类似定义其最优策略.

1.5.2　最小风险最优策略

定义 9　对于给定的目标值 $x \in \mathbf{R}, \mathbf{R} = (-\infty, +\infty)$，及阶段数 n，一个策略为 π^*，若对于所有策略 $\pi \in \Pi$ 及 $i \in S$，均有 $F_n(i, x, \pi^*) \leqslant F_n(i, x, \pi)$，则称 π^* 为关于目标值 x 的 n 阶段**最小风险策略**，称 $F_n(i, x, \pi^*)$ 为 n 阶段未超过目标值 x 的最小风险(概率)值.

需要指出的是，对于一个给定的 MDP 模型，其最优策略是否存在？如存在，如何寻找它的最优策略及最优值函数？能否在较小的策略类中找到最优策略？若不存在，在怎么样较弱的意义下存在？如何获得最优策略及最优值函数的有效算法？这些便是 MDP 应用中关心的主要内容.

下面以一个简单的例子来说明 MDP 的应用.

例 1　考察一简化的设备维修策略问题. 设备有两个状态：正常运行(记作 1)，发生故障(记作 2). 设等周期(如一天)地观察其状态. 处于正常运行时每天可得报酬 10 元，且到下一时段仍保持正常运行的概率为 0.7，而到下一时段出故障的概率为 0.3，即设备状态转移是随机的. 设备正常运行时，可用的行动只有一个——继续运行(记作 a_1)；若处于故障状态，则有两个行动可供选用：快修(记作 a_2)需费用 5 元(即报酬为 -5 元)，且该时段能修复的概率为 0.8；另一个是常规修理(记作 a_3)，需费用 2 元，且在该时段能修复的概率为 0.4. 那么，在各时段应如何根据观察到的状态，确定选用的行动，使整个考察时期的某个期望报酬达最大？

试用 MDP 来描述此问题，此时，$S = \{1, 2\}, A(1) = \{a_1\}, A(2) = \{a_2, a_3\}, A = \{a_1, a_2, a_3\}$，以 $q(j \mid i, a)$ 表示 t 时段设备处于状态 i 选用行动 a，于 $t+1$ 时段转移到状态 j 的概率. $r(i, a)$ 表示 t 时段在 i 状态下，采用 a 所获得的报酬. 将它们列入表 1-1.

表 1-1

状态 i	行动 a	$q(j \mid i, a)$ $j = 1$	$q(j \mid i, a)$ $j = 2$	$r(i, a)$
1	a_1	0.7	0.3	10
2	a_2	0.8	0.2	-5
	a_3	0.4	0.6	-2

若令 $f(1) = a_1, f(2) = a_2, g(1) = a_1, g(2) = a_3$，则 f, g 是两个决策函数. f^∞ 与 g^∞ 分别表示两个决定性平稳策略. 当给定策略 g^∞ 时，表示不管在任何时段当观察到的状态为 1 时，选用行动 $a_1 = g(1)$；当观察到的状态为 2 时，选用的行动为

$$a_3 = g(2).$$

相应的

$$q(1 \mid 1, g(1)) = q(1 \mid 1, a_1) = 0.7, \quad q(2 \mid 1, g(1)) = 0.3;$$
$$q(1 \mid 2, g(2)) = q(1 \mid 2, a_3) = 0.4, \quad q(2 \mid 2, g(2)) = 0.6;$$
$$r(1, g(1)) = r(1, a_1) = 10, \quad r(2, g(2)) = r(2, a_3) = -2.$$

若在 $t=0$ 时设备从状态 i 出发，选用策略 g^{∞}，则到 $t=1$ 时段的期望总报酬为

$$r(i,g(i))+\sum_{j=1}^{2}q(j\mid 1,g(1))r(j,g(j))=V_1(i,g^{\infty}),$$

它显然是初始状态 i 及策略 g^{∞} 的函数（泛函）. 求最优值函数及最优策略的过程（求解过程见 2.3 节例 1）.

如果上例给出优化准则，就可比较在该准则下不同策略的优劣. 上例自然可以推广到多个状态且维修措施是多种的情形.

1.6 博雷尔状态空间的 MDP

以上讨论的 MDP 模型是在状态空间 S 及行动集均为可数的情形下进行的. 这是最简单也是最重要的一种. 为满足实际应用的需要，这里对 S 及 A 均是博雷尔（Borel）空间的 MDP 作一扼要介绍.

1.6.1 博雷尔空间

若 Z 是一完备可分度量空间的博雷尔子集，则称 Z 为**博雷尔空间**，简记为 B 空间. 记 $\mathscr{B}(Z)$ 为由 Z 的所有开子集生成的 **σ 代数.**

例如，通常的 n 维欧几里得空间 $\mathbf{R}^n$ 是 B 空间. 又如一个具有离散拓扑的可列集是 B 空间.

由定义易知，B 空间的子集仍为 B 空间；一串 B 空间序列 $Z_1,Z_2,\cdots$（可数或有限）的乘积空间仍是 B 空间.

1.6.2 S 与 A 是博雷尔空间的 MDP

一个 MDP 由四要素 (S,A,q,r) 组成. 其中 S 为状态空间，是 B 空间；A 为行动集，是 B 空间；q 是转移概率族，即 $q(B\mid k)$ 是**随机核**（条件概率测度）. 更确切地说，此时要求对于任意给定 $k\in K$，$q(\cdot\mid k)$ 是 S 上的概率测度；而对于任意给定 $B\in\mathscr{B}(S)$，$q(B\mid\cdot)$ 是从 K 到 $[0,1]$ 上的可测函数. r 是一步报酬函数，即 r 是 K 到 $\mathbf{R}$ 的可测函数（即从 $(K,\mathscr{B}(K))\to(\mathbf{R},\mathscr{B}(\mathbf{R}))$ 的博雷尔可测函数）.

粗略地说，当 S,A 为 B 空间时，要求 q 及 r 等必须具有"B 可测性". 对策略的定义亦是如此.

一个策略 $\pi=\{\pi_t,t\geqslant 0\}$ 是一串随机核序列. 即对于 $t\geqslant 0$，$\pi_t(B\mid h_t)$，在任意给定 $h_t=(i_0,a_0,\cdots,i_t)\in H$ 时，$\pi_t(\cdot\mid h_t)$ 是 $A(i_t)$ 上的条件概率测度，且 $\pi_t(A(i_t)\mid h_t)=1$；而当任意给定 $B\in\mathscr{B}(A)$ 时，$\pi_t(B\mid\cdot)$ 是从 H_t 到 $[0,1]$ 的可测函数.

在此基础上，可以严格定义出类似于 1.2 节中的其他概念，这里不再重复.

1.6.3 实例

例 2 存贮／销售系统的订货优化.

考虑一有限存货容量 $C > 0$ 的存贮/销售系统.记 Z_t、a_t 及 ξ_t 分别表示 t 时段的存货量、订货量及可能的需求量.ξ_t 是随机的,为简单计,假设它是独立同分布随机变量,其概率密度为 $m(s)$;a_t 是决策者可选的行动;Z_t 是系统的状态变量.设初始值 $Z_0 = x_0$ 与 ξ_t 独立.此时,t 时段的实际销售量为 $\min\{Z_t + a_t, \xi_t\}$,$(t+1)$ 时段的 Z_{t+1} 满足状态方程

$$Z_{t+1} = \max\{Z_t + a_t - \xi_t, 0\}.$$

对此,选 Z_t 为状态变量,a_t 为决策变量,则状态空间与决策集为 $S = A = [0, C]$.在状态为 x 时其可用行动集 $A(x) = [0, C - x]$.转移律 q 为

$$q(B \mid x, a) = \int I_B[\max(x + a - s, 0)]m(s)\mathrm{d}s \qquad (\forall B \in \mathscr{B}([0, C]),$$

其中 $I_B(\cdot)$ 为集合 B 的示性函数.

一步报酬可采用各种形式.这里只考虑最简单形式,例如,已知销售、订货与存贮的单位价格分别为 p, c 及 h,则 t 时段的一步报酬函数为

$$r(x, a) = \int (p\min(s, x + a) - ca - h(x + a))m(s)\mathrm{d}s.$$

若决策的目标函数记为 V,则决策者的目的是研究制定订货方案(策略),使得在目标 V 意义下达最优.这时可用 MDP 的 (S, A, q, r, V) 来解决.

例 3　资源管理与生态控制

近年来,MDP 应用于资源管理与生态控制领域与日俱增,例如应用于森林管理、流行病与虫害控制、石油勘探等,尤其是渔业管理.由于渔业管理与环境诸多方面密切相关,以及与经济状况之间关系复杂,使问题的求解变得较为困难.通常渔业管理的动态变量满足如下形式:

$$\boldsymbol{Z}_{t+1} = F(\boldsymbol{X}_t, \boldsymbol{a}_t, \boldsymbol{\xi}_t),$$

其中 $\boldsymbol{Z}_t$ 是状态变量向量,包含 t 时段渔业产量及经济发展水平;$\boldsymbol{a}_t$ 为 t 时段的控制向量,如捕获率;$\boldsymbol{\xi}_t$ 是扰动变量向量,如随机环境效应,内部生长过程等等.最简单的是单变量情形,Z_t 表示产量.此时,一种动态方程如下:

$$Z_{t+1} = (Z_t - a_t)\exp(\alpha - \beta(Z_t - a_t) + \xi_t),$$

其中 α, β 是正数.如决策者的问题是如何决定捕获方案,使其在 V 意义下经济效益最佳,那么应用 MDP 即可求解.

1.7　非平稳 MDP

在 1.6.2 小节中定义的 MDP$\{S, A, q, r\}$ 称为平稳的,即 S, A, q, r 均与时段 t 无关,记 $N = \{0, 1, 2, \cdots\}$.

定义 10　称 $\{S_t, A_t, q_t, r_t, t \in \mathbf{N}\}$ 为**非平稳 MDP**,其中 S_t 及 A_t 是 t 时段状态空间与行动集,均为 B 空间.若 $Z_t = x \in S_t$,即 t 时段状态为 x,则 $A_t(x)$ 表示状态 x 在 t 时段的允许行动集,它是 A_t 的非空可测子集.若 t 时段采用行动 $a_t = a$, $a \in A_t(x)$,则 $q_t(\cdot \mid x, a)$ 是给定 $k = (x, a)$ 下,t 时段的条件转移概率分布,$r_t(x, a)$ 为 t 时段一步报酬函数.

利用扩大空间的办法可将非平稳 MDP 化为平稳 MDP(S, A, q, r). 定义

$$S = \{(x,t): x \in S_t, t \in \mathbf{N}\},$$

$$A = \{(a,t): a \in A_t, t \in \mathbf{N}\},$$

$$A[(x,t)] = \{(a,t): a \in A_t(x)\}.$$

则对于任意允许的状态 - 行动对$\{(x,t),(a,t)\}$,任意 $B \in \mathscr{B}(S_{t+1})$,

$$q(B \cdot \{t+1\} \mid (x,t),(a,t)) = q_t(B \mid x,a)$$

是转移律,其中

$$B \cdot \{t+1\} = \{(b,t+1): b \in B\}.$$

$$r((x,t),(a,t)) = r_t(x,a)$$

为一步报酬函数.这样即可将非平稳的 MDP$\{S_t, A_t, q_t, r_t, t \in \mathbf{N}\}$ 模型化为平稳的 MDP$\{S, A, q, r\}$ 模型.

最后,需要特别指出的是,一般来说,S, A 各自均可以是有限集、可数无限集、完备可分距离空间的博雷尔集、解析集等;q 除是时齐的之外,也可以是非时齐的、半马氏的、漂移的;r 除有界以外,还可以是无界的、依赖历史的等.此外,准则(目标函数与性能指标)现已有 10 多个了;时间可以是有限的,也可以是无限的,每种又可以是离散的或是连续的.以上几个方面各取一种情形,就可构成一个 MDP.因此,可研究的 MDP 模型是很多的.本篇所介绍的只是最基本的模型.

2　有限阶段模型

2.1　最优策略存在性

本章研究有限阶段模型,即(S, A, q, r, V_n).对于给定 $\pi \in \Pi, i \in S$ 及正整数 n, $V_n(\pi, i)$ 由(1-1)式给出,表示用策略 π,在从 i 出发的条件下,前 $n+1$ 阶段的期望总报酬. $\boldsymbol{V}_n(\pi) = (V_n(\pi, i), i \in S)^{\mathrm{T}}$.

2.1.1　最优值函数与最优策略

定义1　称 $V_n^*(i) = \sup\limits_{\pi \in \Pi} V_n(\pi, i)$ 为从状态 i 出发的有限阶段**最优值函数**,

$$\boldsymbol{V}_n^* = (V_n^*(i), i \in S)^{\mathrm{T}}.$$

注意,记号 sup 表示集合取最小上界,即上确界.例如,

$$\sup_n \{1 - \frac{1}{n}, n \geqslant 1\} = 1.$$

定义2　若策略 $\pi^* \in \Pi$,满足 $\boldsymbol{V}_n(\pi^*) = \boldsymbol{V}_n^*$,则称 π^* 为关于有限阶段准则是最优的,简称为最优策略.

注意:当且仅当对于任意 $\pi \in \Pi$,有 $\boldsymbol{V}_n(\pi^*) \geqslant \boldsymbol{V}_n(\pi)$ 时,π^* 是最优策略.

由于是讨论有限阶段($n+1$ 阶段)准则.因而,一个策略只要知道前($n+1$)阶

段的决策规则就足够了.

2.1.2　最优策略的存在性

定理1　若对于任意 $i \in S, A(i)$ 均为有限集,则必存在一个马氏策略(确定性)$\pi^* = (f_0^*, f_1^*, \cdots, f_n^*)$ 关于有限阶段准则是最优的,即 $V_n(\pi^*) = V_n^*$.

如何寻找最优策略 π^* 及最优值函数 V_n^* 呢?可以用下面介绍的向后归纳法解决.

2.2　向后归纳法

本节假定对于所有 $i \in S, A(i)$ 为有限集.

令

$$\begin{cases} V_*^{n+1}(i) = 0 & (i \in S), \\ V_*^m(i) = \sup\limits_{\pi \in \Pi} E^\pi\left(\sum\limits_{t=m}^{n} R_t(\pi) \mid Z_m = i\right) & (i \in S, 0 \leqslant m \leqslant n). \end{cases} \tag{2-1}$$

2.2.1　最优方程

定理2　由式(2-1)定义的 $V_m^*(i), i \in S, 0 \leqslant m \leqslant n$,满足**最优方程**

$$V_*^m(i) = \max_{a \in A(i)} \{r(i,a) + \sum_{j \in S} q(j \mid i,a) V_*^{m+1}(j)\} \tag{2-2}$$
$$(i \in S, 0 \leqslant m \leqslant n),$$

且若令 $f_m^*(i), i \in S, 0 \leqslant m \leqslant n$,满足

$$r(i, f_m^*(i)) + \sum_{j \in S} q(j \mid i, f_m^*(i)) V_*^{m+1}(j)$$
$$= \max_{a \in A(i)} \{r(i,a) + \sum_{j \in S} q(j \mid i,a) V_*^{m+1}(j)\}, \tag{2-3}$$

则 $\pi^* = \{f_0^*, f_1^*, \cdots, f_n^*\}$ 是最优策略.

由式(2-1)定义的 $V_*^m(i)$ 表示在阶段 m,从状态 i 出发,在余下的 $n+1-m$ 阶段的最优值函数.显然 $V_*^0(i) = V_n^*(i), i \in S$.由式(2-2)的递推最优方程及式(2-3),即可求出最优值函数 V_n^* 及最优策略.以上方法称为**向后归纳法**.

2.2.2　最优化原理

由定理2可得以下推论:

推论1　对于MDP有限阶段模型,比尔曼(Bierman)的最优化原理成立,即若 $\{f_0, f_1, \cdots, f_n\}$ 是从0时段到 n 时段的最优策略,则对于任意 $0 \leqslant m \leqslant n$, $\{f_m, f_{m+1}, \cdots, f_n\}$ 也是从 m 时段到 n 时段的最优策略.

注意:在MDP中,最优化原理是否成立是要严格证明的,而不是作为公理给出的.

2.3 寻优计算实例

例1 以上一章例1 为例，求 $n=3$ 时的最优策略及最优值函数.

解 (1) $n=3$,

由式(2-1)，有

$$V_*^4(i)=0 \qquad (i\in S=\{1,2\}),$$

$$V_*^3(1)=\max\{r(1,a)\}=r(1,a_1)=10.$$

取 $f_3^*(1)=a_1$,

$$V_*^3(2)=\max\{r(2,a_2),r(2,a_3)\}=r(2,a_3)=-2,$$

故 $f_3^*(2)=a_3$.

(2) $n=2$,

$$V_*^2(1)=r(1,a_1)+\sum_{j\in S}q(j\mid 1,a_1)V_*^3(j)$$

$$=10+0.7\times 10+0.3\times(-2)=16.4.$$

取 $f_2^*(1)=a_1$,

$$\begin{aligned}V_*^2(2)&=\max\{-5+0.8\times 10+0.2\times(-2),\\&\qquad -2+0.4\times 10+0.6\times(-2)\}\\&=\max\{2.6,0.8\}=2.6,\end{aligned}$$

故 $f_2^*(2)=a_2$.

(3) $n=1$,

$$V_*^1(1)=10+0.7\times 16.4+0.3\times 2.6=22.26.$$

取 $f_1^*(1)=a_1$,

$$\begin{aligned}V_*^1(2)&=\max\{-5+0.8\times 16.4+0.2\times 2.6,\\&\qquad -2+0.4\times 16.4+0.6\times 2.6\}\\&=\max\{8.64,6.12\}=8.64,\end{aligned}$$

故 $f_1^*(2)=a_2$.

(4) $n=0$,

$$V_*^3(1)=10+0.7\times 22.26+0.3\times 8.64=28.174.$$

取 $f_0^*(1)=a_1$,

$$\begin{aligned}V_*^0(2)&=\max\{-5+0.8\times 22.26+0.2\times 8.64,\\&\qquad -2+0.4\times 22.26+0.6\times 8.64\}\\&=\max\{14.536,12.088\}=14.536,\end{aligned}$$

故 $f_0^*(2)=a_2$.

所以，最优值函数为

$$V_3(\pi^*,1)=28.174,\quad V_3(\pi^*,2)=14.536.$$

最优策略，

$$\pi^*=\{f_0^*,f_1^*,f_2^*,f_3^*\}=\{f,f,f,g\},$$

其中 f,g 的定义是上一章例 1 所定义的决策函数.

下面列举 S 与 A 是实数集的例子.

2.4 投资决策优化

考虑一个简化的 N 阶段序贯投资决策优化问题.设在 N 阶段上的每阶段出现投资机会的概率是 $p(0 < p < 1)$,且它与以往投资机会出现与否相互独立.当出现投资机会时,决策者必须决定在剩下的资金中应投多少.若投 y,则在 N 阶段将获得报酬 $R(y)$.那么,如何投资使在 N 阶段的投资期望总报酬达最大?

假设投资者开始时有 D 元资金.$R(y)$ 是 y 的非降凹函数且 $R(0)=0$.记 $V_n(x)$ 为距结束还有 n 阶段时,在投资机会出现的条件下,还剩有资金 x 可以用于投资的情况下将获得的最大期望总报酬.$\bar{V}_m(x)$ 为距结束还有 m 阶段时,还剩有资金 x 可以用于投资的情况下将获得的最大期望总报酬.此问题的状态空间为 $S=[0,D]$.在有资金为 $x\in[0,D]$ 时,可采用的行动集 $A(x)=[0,x]$,函数 $V_n(x)(x\in[0,D])$ 满足最优方程

$$\begin{cases} V_n(x) = \max\limits_{0\leqslant y\leqslant x}(R(y)+\bar{V}_{n-1}(x-y))n>0. \\ V_0(x)=0. \end{cases} \tag{2-4}$$

由全概率公式,可得

$$V_m(x) = \sum_{i=0}^{m} p(1-p)^i V_{m-i}(x)$$

及

$$\bar{V}_m(x) = pV_m(x) + (1-p)\bar{V}_{m-1}(x).$$

记 $y_n(x)$ 是使式(2-4) 右边达到最大的值,即

$$\max_{0\leqslant y\leqslant x}\{R(y)+\bar{V}_{n-1}(x-y)\} = R(y_n(x)) + \bar{V}_{n-1}(x-y_n(x)). \tag{2-5}$$

这也就是说,距末了还有 n 阶段,当投资者还有资金为 x 时的最优投资值是 $y_n(x)$.

因此,用式(2-4) 与式(2-5),可求解最优投资策略 $\{y_n(x), 1\leqslant n\leqslant N\}$.

可以证明:① $y_n(x)$ 是 x 的非降函数;② $y_n(x)$ 是 n 的非增函数.

2.5 股票 - 期权模型

记 X_k 为第 k 天($k\geqslant 1$) 股票的价格.为简单计,设它满足

$$X_{k+1} = X_k + \xi_{k+1} = s_0 + \sum_{i=1}^{k+1}\xi_i,$$

其中 $\{\xi_i, i\geqslant 1\}$ 是独立同分布随机变量,分布函数为 $F(x)$,且与 s_0(初始价格) 独立.假设某人拥有股票价格商定为 c 的期权,且有 N 天可以使用,他也有权不使用它,但假如使用它的当天,股票价格为 s,那么他将获利润 $s-c$.使用什么样的策略才能使期望利润达最大呢?

记 $V_n(s)$ 是股票价格为 s,且期权还有 n 天可以使用的最大期望利润,则 V_n 满足最优方程

$$V_n(s) = \max\left\{s - c, \int V_{n-1}(s + x)\mathrm{d}F(x)\right\} \qquad (n \geqslant 1), \tag{2-6}$$

初始条件 $$V_0(s) = \max(s - c, 0).$$

这里无法得到 $V_n(s)$ 的显式解.然而由它的简单性质可以得到:$V_n(s) - s$ 是 s 的减函数.记

$$s_n = \inf\{s : V_n(s) - s + c = 0\} \qquad (\text{约定 } \inf\varnothing = +\infty). \tag{2-7}$$

可以证明:$s_1 \leqslant s_2 \leqslant \cdots \leqslant s_n \leqslant \cdots$ 于是,最优策略由如下定理给出.

定理3　s_n 由式(2-7)定义,最优策略如下:设距期权到期还有 n 天的股票价格为 s,若 $s \geqslant s_n$,就使用它,否则不用.

3　折扣模型

本章研究折扣模型(S, A, q, r, V_β),其中 V_β 为折扣期望总报酬向量.对于给定的 $\pi \in \Pi, i \in S, V_\beta(\pi, i)$ 由1.4.2小节的式(1-2)定义.$\beta \in [0,1)$ 为折扣因子(是任意的,但认为是已给定的).折扣模型是MDP中最基本的模型之一,它有许多好的性质,至今已研究得较为深入,理论成果与算法也较完善.

3.1　预备知识

3.1.1　基本假定

假定 S 状态空间为可列集,A 为有限集.报酬函数有界,即存在 $M > 0$,

$$M = \sup_{i \in S, a \in A(i)} |r(i, a)| < +\infty.$$

3.1.2　记号与(B, ρ)空间

设 $\boldsymbol{U} = (U(i), i \in S)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{V} = (V(i), i \in S)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{e}$ 为 S 上的单位列向量.$\boldsymbol{U} \geqslant \boldsymbol{V}$ 表示 $U(i) \geqslant V(i), i \in S$. $\boldsymbol{U} > \boldsymbol{V}$ 表示 $\boldsymbol{U} \geqslant \boldsymbol{V}$,且 $\boldsymbol{U} \neq \boldsymbol{V}$.记

$$\boldsymbol{r}(f) = (r(i, f), i \in S)^{\mathrm{T}},$$

其中

$$r(i, f) = r(i, f(i)), f \in F;$$

$$\boldsymbol{Q}(f) = [q(j \mid i, f)]$$

为转移概率矩阵,其中 $q(j \mid i, f) = q(j \mid i, f(i))$;

$$\boldsymbol{V}_\beta^* = \sup_{\pi \in \Pi} \boldsymbol{V}(\pi),$$

称 $V_\beta^*(i)$ 为折扣模型最优值函数;

$$B = \{\boldsymbol{V}: -(1 - \beta)^{-1}M\boldsymbol{e} \leqslant \boldsymbol{V} \leqslant (1 - \beta)^{-1}M\boldsymbol{e}\};$$

称
$$\rho(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}) = \|\boldsymbol{U}-\boldsymbol{V}\| = \sup_{i\in S}|U(i)-V(i)|$$
为 $\boldsymbol{U}$ 与 $\boldsymbol{V}$ 的距离，其中 $\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}\in B$.

引理1　1° $\forall \pi\in\Pi$, $\boldsymbol{V}_\beta(\pi) = (V_\beta(\pi,i), i\in S)^{\mathrm{T}}\in B$;

2° (B,ρ) 是完备度量空间.

由引理知，所有目标值向量均在 B 中；且对于任意 $\{\boldsymbol{U}_n, n\geqslant 1\}\subset B$，若
$$\lim_{\substack{n\to\infty\\ m\to\infty}}\|\boldsymbol{U}_n-\boldsymbol{U}_m\| = 0,$$
则必存在 $U\in B$，满足
$$\lim_{n\to\infty}\|\boldsymbol{U}_n-\boldsymbol{U}\| = 0\quad(\text{即}\lim_{n\to\infty}\boldsymbol{U}_n = U).$$

3.1.3　压缩变换 T_f, T

定义 1　对于任意给定 $f\in F$, $\boldsymbol{V}\in B$，定义 T_f 是从 B 到 B 的变换（也称 T_f 算子或 T_f 映射），即定义 **T_f 变换**：$B\to B$ 如下：
$$\mathrm{T}_f\boldsymbol{V} = \boldsymbol{r}(f) + \beta\boldsymbol{Q}(f)\boldsymbol{V},\tag{3-1}$$
写成分量形式为
$$\mathrm{T}_fV(i) = r(i,f) + \beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,f)V(j)\qquad(i\in S).$$
记　$\mathrm{T}_f^n\boldsymbol{V} = \mathrm{T}_f(\mathrm{T}_f^{n-1}\boldsymbol{V})$,　$\mathrm{T}_f^0\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}$.

定义 2　对于任意 $\boldsymbol{V}\in B$，定义 **T 变换**：$B\to B$ 如下：
$$\mathrm{T}\boldsymbol{V} = \sup_{f\in F}\mathrm{T}_f\boldsymbol{V}\tag{3-2}$$
或等价地写成分量形式
$$\mathrm{T}V(i) = \sup_{a\in A(i)}\{r(i,a) + \beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,a)V(j)\}\qquad(i\in S).$$
记　$\mathrm{T}^n\boldsymbol{V} = \mathrm{T}(\mathrm{T}^{n-1}\boldsymbol{V})$,　$\mathrm{T}^0\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}$.

变换 T_f 及 T 有如下的主要性质.

定理 1　任给 $f\in F$,

1° T_f 是 $B\to B$ 的单调压缩变换，即任给 $\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}\in B$，有 $\rho(\mathrm{T}_f\boldsymbol{V},\mathrm{T}_f\boldsymbol{U})\leqslant\beta\rho(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V})$（压缩性）；若 $\boldsymbol{U}\geqslant\boldsymbol{V}$，则 $\mathrm{T}_f\boldsymbol{U}\geqslant\mathrm{T}_f\boldsymbol{V}$（单调性）.

2° $V_\beta(f^\infty)$ 是 T_f 在 B 上的唯一不动点，即
$$\mathrm{T}_fV_\beta(f^\infty) = V_\beta(f^\infty).\tag{3-3}$$

3° 任给 $\boldsymbol{V}^{(0)}\in B$，记 $\boldsymbol{V}^{(n)} = \mathrm{T}_f^n\boldsymbol{V}^{(0)}$，即
$$\boldsymbol{V}^{(n)} = \mathrm{T}_f\boldsymbol{V}^{(n-1)},$$
则
$$\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty) = \lim_{n\to\infty}\mathrm{T}_f^{(n)}\boldsymbol{V}^{(0)} = \lim_{n\to\infty}\boldsymbol{V}^{(n)}.\tag{3-4}$$

4° $\forall\, n\geqslant 1$,
$$\mathrm{T}_f^n\boldsymbol{0} = \sum_{t=0}^{n-1}(\beta\boldsymbol{Q}(f))^t\boldsymbol{r}(f),$$
$$\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty) = \sum_{t=0}^{\infty}(\beta\boldsymbol{Q}(f))^t\boldsymbol{r}(f).\tag{3-5}$$

定理1为求 $V_\beta(f^\infty)$ 提供了迭代逼近算法.

定理2　1° T是 $B\to B$ 的单调压缩变换,即任给 $U,V\in B$, $\rho(TU,TV)\leqslant\beta\rho(U,V)$,且若 $U\geqslant V$,有 $TU\geqslant TV$.

2° V_β^* 是T在 B 上的唯一不动点,即

$$TV_\beta^* = V_\beta^*. \tag{3-6}$$

称式(3-6)为最优方程.

3° 任给 $V\in B$,则

$$V_\beta^* = \lim_{n\to\infty} T^n V \tag{3-7}$$

且

$$\rho(T^n V, V_\beta^*)\leqslant\beta^n(1-\beta)^{-1}\rho(TV,V).$$

定理2为求最优值函数 V_β^* 提供算法依据及误差估计.

3.2　最优策略存在性及性质

在 A 为有限集的条件下,折扣模型最优策略必存在且有以下结果.

3.2.1　最优策略

定理3　下列命题等价:

1° $\pi^*\in\Pi$ 是最优的;

2° $V_\beta(\pi^*) = V_\beta^* = \sup_{\pi\in\Pi} V_\beta(\pi)$;

3° 对于所有 $i\in S, n\geqslant 0$,

$$V_n(\pi^*,i) = E^{\pi^*}(V_\beta^*(Z_n)\mid Z_0 = i),$$

其中

$$V_n(\pi^*,i)\stackrel{\text{def}}{=\!=} E^{\pi^*}\left(\sum_{t=n}^{\infty}\beta^{t-n}R_t\mid Z_0 = i\right).$$

定理4　存在一确定性马氏策略 $\pi^* = \{f_n^*, n\geqslant 0\}\in\Pi_M^d$ 是折扣准则最优的.

注意:当 A 为可数集时,上述结论一般不成立.但可以证明,必存在一确定性马氏策略是 ε 最优的.

定理5　设 $\pi^*\in\Pi$,若对于任意 $g\in F$,均有

$$T_g V_\beta(\pi^*)\leqslant V_\beta(\pi^*),$$

则 π^* 是最优的.

定理6　若 $f\in F$ 满足　$V_\beta^* = T_f V_\beta^*$,则 f^∞ 是确定性最优策略.

定理7　设 $\pi^* = \{f_0,f_1,\cdots,f_t,\cdots\}\in\Pi_M^d$ 是最优策略,则 f_0^∞ 是确定性平稳最优策略(对于固定的 β).

更为一般地,有:

定理8　若 $\pi^* = \{\pi_t^*, t\geqslant 0\}$ 是最优的,则 $\pi_0^{*\infty}$ 也是最优的.

3.2.2　最优策略性质

为了从直观上了解最优策略的结构,令

$$A_\beta^*(i) = \{a : r(i,a) + \beta\sum_{j\in S} q(j \mid i,a)V_\beta^*(j) = V_\beta^*(i), a \in A(i)\} \quad (i \in S),$$

称 $A_\beta^*(i)$ 为折扣 β 状态 i 的最优行动集.

定理9 设 $\pi^* = \{\pi_t^*, t \geq 0\} \in \Pi$ 是最优的,则

1° 对于所有 $i \in S, A_\beta^*(i) \neq \varnothing$.

2° $\pi_0^*(A_\beta^*(i) \mid i) = 1$.

3° 记 $A_{\pi_0^*}(i) = \{a : \pi_0^*(a \mid i) > 0, a \in A(i)\} \qquad (i \in S)$.

如任取 $f \in F$ 满足

$$f(i) \in A_{\pi_0^*}(i) \qquad (\forall i \in S),$$

则 f^∞ 亦是平稳最优的.

4° 任取 $f, g \in F$,使 $f(i), g(i) \in A_{\pi_0^*}(i), \forall i \in S$. 令

$$\pi_0(f(i) \mid i) = \alpha(i), \quad \pi_0(g(i) \mid i) = 1 - \alpha(i) \qquad (i \in S),$$

其中 $\alpha(i) \in [0,1]$,则 π_0^∞ 亦是平稳最优的.

定理9说明,任何 β 最优行动集上的"凸组合"构成的平稳策略均是同一 β 的最优策略. 因此,有如下定理.

定理 10 存在一个 $g \in F$,使得

$$\boldsymbol{V}_\beta^* = \sup_{\pi \in \Pi} \boldsymbol{V}_\beta(\pi) = \sup_{\pi \in \Pi_M^d} \boldsymbol{V}_\beta(\pi) = \sup_{f \in F} \boldsymbol{V}_\beta(f^\infty) = \boldsymbol{V}_\beta(g^\infty),$$

即存在平稳策略是最优的.

这说明,当 A 为有限集时,最优平稳策略必定存在,且只需在 Π_s^d 上寻优即可,这大大缩小了寻优范围. 尽管如此,许多实际问题 F 集合中的元素数量仍然很大. 例如 $|S| = 30, |A| = 2$. ($|S|$ 表集合 S 的元素个数),则 $|F| = 1\ 073\ 741\ 824$. 若用穷举法寻优,则工作量相当大. 因此,研究寻优的有效算法十分必要.

以下讨论假定 F 为有限集,即 S, A 均为有限集.

3.3 策略迭代法

策略迭代法是1960年由霍华德(R.A.Howard)提出的.

3.3.1 算法原理

当已给策略 f^∞ 时,如何求 $V_\beta(f^\infty)$?

定理11 任给 $f \in F$,泛函方程

$$\boldsymbol{V} = \boldsymbol{r}(f) + \beta Q(f)\boldsymbol{V} \tag{3-8}$$

有唯一的有界解 $V = V_\beta(f^\infty) \in B$.

将式(3-8)写成分量形式,有

$$V(i) = r(i, f(i)) + \beta\sum_j q(j \mid i, f(i))V(j) \qquad (i \in S).$$

把 $\{V(i), i \in S\}$ 作为未知量求解以上方程组即得 $V_\beta(f^\infty)$. 一般说,这比计算

级数式(3-5)要容易些.那么,f^∞是否最优? 如不是,如何得到一个比 f^∞ 更好的策略? 为此,可对已求得的 $V_\beta(f^\infty)$,定义一个新策略 g^∞.设 $f'\in F$,定义

$$T_g\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)=\max_{f'\in F}\{\boldsymbol{r}(f')+\beta Q(f')\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)\}=\boldsymbol{r}(g)+\beta Q(g)\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty).$$

将上式写成分量形式,有

$$\begin{aligned}&\max_{f'(i)\in A(i)}\{r(i,f'(i))+\beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,f'(i))V_\beta(f^\infty,j)\}\\&=\max_{a\in A(i)}\{r(i,a)+\beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,a)V_\beta(f^\infty,j)\}\\&=r(i,g(i))+\beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,g(i))V_\beta(f^\infty,j)\qquad(i\in S).\end{aligned}$$

这样改进的策略 g^∞ 要比原策略 f^∞ 好.这有下面的定理作根据.

定理12 设 $f,g\in F$, $\boldsymbol{V}\in B$.

1° 若 $T_g\boldsymbol{V}\geqslant\boldsymbol{V}$,则 $\boldsymbol{V}_\beta(g^\infty)\geqslant\boldsymbol{V}$;若 $T_g\boldsymbol{V}>\boldsymbol{V}$,则 $\boldsymbol{V}_\beta(g^\infty)>\boldsymbol{V}$.

2° 若 $T_g\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)=T\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)$,即对于 $i\in S$,

$$\begin{aligned}&r(i,g(i))+\beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,g(i))V_\beta(f^\infty,j)\\&\qquad=\max_{a\in A(i)}\{r(i,a)+\beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,a)V_\beta(f^\infty,j)\},\end{aligned}$$

则

$$\boldsymbol{V}_\beta(g^\infty)\geqslant\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty).$$

若 $T_g\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)=T\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)$,则对于任何 $f'\in F$, $T_{f'}\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)\leqslant\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)$.由定理5可知,$f^\infty$是最优策略,$\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)$是最优值函数.若 $T_g\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)=T\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)>\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)$,则有 $\boldsymbol{V}_\beta(g^\infty)>\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)$,因而 g^∞ 比 f^∞ 更好.实现了策略改进.

因为 F 为有限集,又每次是严格改正的,用 g 代 f,重复上面步骤,经有限次改进,必能找到最优策略.

3.3.2 策略迭代法步骤

(1)策略求值 任给初始策略 $f\in F$,对 f^∞ 解方程组

$$V(i)=r(i,f(i))+\beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,f(i))V(j)\qquad(i\in S),$$

求得

$$\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)=\boldsymbol{V}.$$

(2) 策略改正规则 寻找 $g\in F$,使

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{r}(g)+\beta Q(g)\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)\\&=\max_{h\in F}\{\boldsymbol{r}(h)+\beta Q(h)\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty)\}\\&\geqslant\boldsymbol{r}(f)+\beta Q(f)\boldsymbol{V}_\beta(f^\infty),\end{aligned}\tag{3-9}$$

即选 $g(i)\in A(i)$,使下列方程右边到达最大值:

$$r(i,g(i))+\beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,g(i))V_\beta(f^\infty,j)$$

$$= \max_{a \in A(i)} \{ r(i,a) + \beta \sum_{j \in S} q(j \mid i,a) V_\beta(f^\infty, j) \} \qquad (i \in S).$$

若达到右边最大的 g 不止一个，则任取一个. 若 f 也达到右边最大，就取 f 作为 g.

(3) 终止规则　若式(3-9)恒成立，则 f^∞ 为最优. $V_\beta(f^\infty)$ 为最优值函数，故终止迭代；若至少有一分量严格不等式成立，则以 g 代替 f，转入步骤(1).

3.3.3　计算实例

例1　设有一工厂生产某种产品，其销售情况好，记为状态 1，销售情况坏记为状态 2，故 $S = \{1,2\}$. 每个状态均有二个行动供选择：登广告(记作 a_1)和不登广告(记作 a_2). 考察该工厂单位时段销售情况及采取的行动后，下时段状态的转移是随机的，其转移概率 $q(j \mid i,a)$ 及一步报酬函数 $r(i,a)$ 如表 3-1 所示.

表 3-1

状态 i	行动 a	$q(j \mid i,a)$		$r(i,a)$
		$q(1 \mid i,a)$	$q(2 \mid i,a)$	
1	a_1	0.8	0.2	4
	a_2	0.5	0.5	6
2	a_1	0.7	0.3	-5
	a_2	0.4	0.6	-3

对于 $\beta = 0.9$ 的折扣准则，用策略迭代法求最优策略及最优值函数(取两位小数)

解　$A(1) = A(2) = \{a_1, a_2\}$.

(1) 取初始策略 $f_0(1) = a_2, i \in S$. 对 f_0 解方程组

$$\begin{cases} V_1(1) = 6 + 0.9(0.5V_1(1) + 0.5V_1(2)), \\ V_1(2) = -3 + 0.9(0.4V_1(1) + 0.6V_1(2)), \end{cases}$$

得

$$V_1(1) = 15.49, \quad V_1(2) = 5.60.$$

(2) 策略改进

$$\max_{a \in A(1)} \{6 + 0.9(0.5 \times 15.49 + 0.5 \times 5.60), 4 + 0.9(0.8 \times 15.49 + 0.2 \times 5.60)\}$$
$$= \max\{15.49, 16.16\} = 16.16,$$

上式是当 $i = 1$ 取 a_1 时，达最大，故取 $f_1(1) = a_1$.

$$\max\{-5 + 0.9(0.7 \times 15.49 + 0.3 \times 5.60), -3 + 0.9(0.4 \times 15.49 + 0.6 \times 5.60)\}$$
$$= \max\{7.52, 5.60\} = 7.52,$$

故取 $f_1(2) = a_1$.

(3) 以 f_1 代替 f_0，对 f_1 解方程组

$$\begin{cases} V_2(1) = 4 + 0.9(0.8V_2(1) + 0.2V_2(2)), \\ V_2(2) = -5 + 0.9(0.7V_2(1) + 0.3V_2(2)), \end{cases}$$

得

$$V_2(1) = 22.20, \quad V_2(2) = 12.31.$$

(4) 第二次策略改进

$$\max\{22.20, 6 + 0.9(0.5 \times 22.20 + 0.5 \times 12.31)\}$$

$$= \max\{22.20, 21.53\} = 22.20,$$

故仍取 $f_2(1) = a_1 = f_1(1)$.

$$\max\{12.31, -3 + 0.9(0.4 \times 22.20 + 0.6 \times 12.31)\}$$
$$= \max\{12.31, 11.64\} = 12.31,$$

故仍取 $f_2(2) = a_1 = f_1(2)$.

因此，f_2^∞ 是 $\beta = 0.9$ 的最优策略．最优值函数

$$\boldsymbol{V}_\beta^* = \boldsymbol{V}_\beta(f_2^\infty) = (22.20, 12.31)^{\mathrm{T}}.$$

3.4 逐次逼近法

3.4.1 算法依据

由本章定理 2 可知，最优值函数 V_β^* 是方程

$$\mathrm{T}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}$$

的唯一有界解，即 V_β^* 满足动态最优方程

$$\boldsymbol{V}_\beta^* = \sup_{f \in F}\{\boldsymbol{r}(f) + \beta \boldsymbol{Q}(f)\boldsymbol{V}_\beta^*\}. \tag{3-10}$$

将上式写成分量形式，有

$$V_\beta^*(i) = \sup_{a \in A(i)}\{r(i,a) + \beta\sum_{j \in S} q(j \mid i,a) V_\beta^*(j)\}.$$

设 $|S| = l$，则对于任意 l 维向量 $\boldsymbol{V} \in B$，当 $n \to \infty$ 时，$\mathrm{T}^n\boldsymbol{V} \to \boldsymbol{V}_\beta^*$，且

$$\rho(\mathrm{T}^n\boldsymbol{V}, \boldsymbol{V}_\beta^*) \leqslant \beta^n(1-\beta)^{-1}\rho(\mathrm{T}\boldsymbol{V}, \boldsymbol{V}).$$

因此，可以借用**逐次逼近法**求解最优值函数 $\boldsymbol{V}_\beta^*$.

任取 $\boldsymbol{V}_0 \in B$，分别定义 $\boldsymbol{V}_n, f_n$ 如下：

$$\begin{cases} \boldsymbol{V}_{n+1} = \mathrm{T}\boldsymbol{V}_n = \max\limits_{f \in F}\{\boldsymbol{r}(f) + \beta\boldsymbol{Q}(f)\boldsymbol{V}_n\} & (n \geqslant 1), \\ \boldsymbol{r}(f_n) + \beta\boldsymbol{Q}(f_n)\boldsymbol{V}_n = \max\limits_{f \in F}\{\boldsymbol{r}(f) + \beta\boldsymbol{Q}(f)\boldsymbol{V}_n\} & (n \geqslant 1). \end{cases} \tag{3-11}$$

将上式写成分量形式，即

$$\begin{aligned} V_{n+1}(i) &= \max_{f(i) \in A(i)}\{r(i,f(i)) + \beta\sum_{j \in S} q(j \mid i, f(i)) V_n(j)\} \\ &= r(i, f_n(i)) + \beta\sum_{j \in S} q(j \mid i, f_n(i)) V_n(j)\} \end{aligned} \tag{3-12}$$

由于 F 有限，即 $S, A(i)(i \in S)$ 均有限，故式(3-11)、式(3-12) 中的最大值一定能达到，即存在 $f_n \in F(f_n(i) \in A(i), i \in S)$ 满足式(3-11)、式(3-12).

由上可知，当给出误差限时，可用逐次逼近法求 V_β^* 的近似值 V_n，那么如何得到最优策略或 ε 最优策略呢？一般情况下，这个算法并不保证经有限次迭代能得到最优策略．但在 F 有限集时，却有以下的有限步选优定理．

定理 13 设 $\{f_n, n \geqslant 1\}$ 是由式(3-11) 递推定义的.

$$A_\beta^*(i) = A^*(i) = \{a : a \in A(i), r(i,a) +$$

$$\beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,a)V_\beta^*(j)=V_\beta^*(i)\}\qquad(i\in S).$$

$$\overline{A^*(i)}=A(i)-A^*(i),\quad S^\triangle=\{i:i\in S,\overline{A^*(i)}\neq\varnothing\}.$$

1° 若 $S^\triangle=\varnothing$，则对于任给 $f\in F$，f^∞ 均为最优策略，从而对于 $n\geqslant 1$，f_n^∞ 均为最优策略.

2° 若 $S^\triangle\neq\varnothing$，记

$$\delta=\min_{i\in S^\triangle}\min_{b\in\overline{A^*(i)}}\{V_\beta^*(i)-r(i,b)-\beta\sum_{j\in S}q(j\mid i,b)V_\beta^*(j)\}>0,$$

则存在

$$N\geqslant\{\ln(\delta(1-\beta)l^{-1}\|TV-V\|^{-1})\frac{1}{\ln\beta},$$

当 $n>N$ 时 f_n^∞ 均为最优策略，其中 V 为迭代初始值，$|S|=l$.

定理 13 说明，用逐次逼近算法，在 F 为有限集时，经有限步迭代，必可获最优策略. 初始向量 V 的选取，将影响迭代所需的步数 N. 实际计算时尽可能选择使 $\|TV-V\|$ 达最小的 V. 通常可取 $V=0$ 或 $V=\max_{f\in F}r(f)$.

逐次逼近法有时称为值迭代法.

3.4.2　逐次逼近法步骤

(1) 任取 l 维向量 $V_0\in B$.

(2) 递归定义 $\{V_n,n\geqslant 0\}$ 及 $\{f_n,n\geqslant 1\}$ 如下：

$$V_{n+1}=TV_n=\max\{r(f)+\beta Q(f)V_n\}=r(f_n)+\beta Q(f_n)V_n.$$

(3) 终止迭代. 迭代的终止规则通常要根据实例的要求灵活掌握：① 当对最优值给出精度要求时，只要求出满足精度要求的 ε 最优策略即可. ② 当求解 $V=r(f)+\beta Q(f)V$ 较方便时可对 f_n 求解，即求解 $V=r(f_n)+\beta Q(f_n)V$，得出 $V_\beta(f_n^\infty)$. 若 $V_\beta(f_n^\infty)$ 满足最优方程 $TV(f_n^\infty)=T_{f_n}V(f_n^\infty)=V(f_n)$，即可终止迭代，$f_n^\infty$ 即为最优策略；否则继续迭代. ③ 当 $N=\{\frac{1}{\ln\beta}\ln(S(1-\beta)l^{-1}\|TV-V\|^{-1})\}$ 能求出时，只需迭代到 $n=N+1$ 次即可终止.

3.4.3　计算实例

例2　对于 3.3.3小节的例1，对于 $\beta=0.9$时的折扣准则，用逐次逼近法求解.

解　取 $V_0(i)=0,i=1,2.$

$$V_1(1)=\max\{r(1,a_1),r(1,a_2)\}=r(1,a_2)=6,$$

故取 $f_1(1)=a_2$.

$$V_1(2)=\max\{r(2,a_1),r(2,a_2)\}=r(2,a_2)=-3,$$

故取 $f_1(2)=a_2$.

$$V_2(1)=\max_{a\in A(1)}\{r(1,a)+0.9\sum_{j=1}^{2}q(j\mid i,a)V_1(j)\}$$

$$= \max\{4 + 0.9(0.8 \times 6 + 0.2 \times (-3)), 6 + 0.9(0.5 \times 6 + 0.5 \times (-3)\}$$
$$= \max\{7.78, 7.35\} = 7.78 = r(1, a_1) + 0.9\sum_j q(j \mid i, a_1) V_1(j),$$

故取 $f_2(1) = a_1$.类似地,

$$V_2(2) = \max\{-5 + 0.9(0.7 \times 6 + 0.3(-3), -3 + 0.9(0.4 \times 6 + 0.6 \times (-3))\}$$
$$= \max\{-2.03, -2.46\} = -2.03 = r(2, a_1) + 0.9\sum_j q(j \mid i, a_1) V_1(j),$$

故取 $f_2(2) = a_1$.

照此迭代,得

$$V_3 = (9.24, -0.65)^{\mathrm{T}}, \quad f_3(i) = a_1 \quad (i = 1, 2).$$
$$V_4 = (10.54, 0.65)^{\mathrm{T}}, \quad f_4(i) = f_3(i) = a_1 \quad (i = 1, 2).$$

可暂停迭代,以 $f_2(i) = a_1, i = 1, 2$.求解方程 $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{r}(f_2) + 0.9\boldsymbol{Q}(f_2)\boldsymbol{V}$,可得

$$\boldsymbol{V}(f_2^\infty) = (22.20, 12.31)^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}_\beta^*,$$

故 f_2^∞ 为最优策略.

3.5　线性规划法

对于折扣准则,求最优策略与最优值函数的问题,可以化为求解相应的线性规划(LP)问题:

寻求 $l(|S| = l)$ 维向量满足:

规划 Ⅰ	规划 Ⅱ
$\min\limits_{\boldsymbol{V} \in B} \boldsymbol{V}$	$\max\limits_{\boldsymbol{V} \in B} \boldsymbol{V}$
满足约束条件	满足约束条件
$\mathrm{T}\boldsymbol{V} \leqslant \boldsymbol{V}$;	$\mathrm{T}\boldsymbol{V} \geqslant \boldsymbol{V}$.

定理14　最优值函数 $\boldsymbol{V}_\beta^*$ 是上述两个规划的最优解.其最优策略由使约束条件等式成立的决策函数所构成.

需要说明的是,因 $\boldsymbol{V}_\beta^*$ 满足 $\mathrm{T}\boldsymbol{V}_\beta^* = \boldsymbol{V}_\beta^*$,故 $\boldsymbol{V}_\beta^*$ 是两个规划的可行解.进而可证 $\boldsymbol{V}_\beta^*$ 为它们的最优解;而对于 $f \in \boldsymbol{F}$,若 $\mathrm{T}_f\boldsymbol{V}_\beta^* = \boldsymbol{V}_\beta^*$,则 $V_\beta(f^\infty) = \boldsymbol{V}_\beta^*$,亦即 f^∞ 为最优.

从这两个LP问题的比较看,规划 Ⅰ 有明显的优点,因为规划 Ⅰ 的约束条件成立的充分必要条件是对于每个 $f \in \boldsymbol{F}$,均有 $\boldsymbol{r}(f) + \beta\boldsymbol{Q}(f)\boldsymbol{V} \leqslant \boldsymbol{V}$;而规划 Ⅱ 的约束条件成立的充分必要条件是至少存在一个 $f \in \boldsymbol{F}$,使 $\boldsymbol{r}(f) + \beta\boldsymbol{Q}(f)\boldsymbol{V} \geqslant \boldsymbol{V}$,后者在求解时很难处理.

由最优策略定义知,所有状态 $i \in S$ 都要使折扣准则达最优,因而 $\min\boldsymbol{V}$ 等价于 $\min\sum\limits_{i \in S} V(i)$,或等价于使 $\{V(i), i \in S\}$ 任一正的线性凸组合达最小.故规划 Ⅰ 可写成如下形式:

规划 Ⅰ

$$\min \sum_{i\in S} a_i V_i(i) \tag{3-13}$$

满足约束条件

$$r(i,a) + \beta \sum_{j\in S} q(j\mid i,a)V(j) \leqslant V(i) \qquad (a\in A(i), i\in S), \tag{3-14}$$

其中 $a_i > 0, \sum_{i\in S} a_i = 1$,是任意给定的常数.

规划 Ⅰ 的对偶规划记作 Ⅰ′,其规划可写成:

规划 Ⅰ′

$$\max \sum_{i\in S}\sum_{a\in A(i)} x(i,a) r(i,a) \tag{3-15}$$

满足约束条件

$$\sum_{i\in S}\sum_{a\in A(i)} (\delta_{ij} - \beta q(j\mid i,a)) x(i,a) = a_j \qquad (j\in S), \tag{3-16}$$

$$x(i,a) \geqslant 0 \qquad (a\in A(i), i\in S). \tag{3-17}$$

定理15　对于所有 $j\in S$,均有 $a_j > 0$时,任一平稳策略都对应于式(3-16)的一个基础可行解,且是非退化的;反之,式(3-16)的任一可行解至少对应于一个平稳策略.

定理16　对于所有 $j\in S$,均有 $a_j > 0$时,规划 Ⅰ 有一最优基础解.与此相联的任一最优平稳策略,对于任何非负数组$\{a_j\}$,均保持最优性.

由以上定理可知,可从一个适当的初始分布(如 $a_j = 1/l$)开始,用单纯形法解规划 Ⅰ′,求得一个最优基础解,从而得到一个最优平稳策略.若还需求最优值函数,则只需再作策略求值运算即可得到.

需要强调指出的是,以上给出常用的三种算法,各有优缺点.通常在 l 较小时,用策略改正法;当 l 较大时,用逐次逼近法.自然还有三种算法的变形与混合.

3.6　博雷尔空间 MDP 的折扣模型

前几节讨论的折扣模型都是在状态空间 S 为可数集,而行动集 A 为有限集的条件下建立的.本节讨论 S 和 A 均为博雷尔空间的情形.称

$$(S, A, q, r, V_\beta) \tag{3-18}$$

为博雷尔空间MDP折扣模型.其中 S, A, q, r 与1.6.2小节中的定义相同;S, A 均为博雷尔空间;q 是随机核,即是从 K 到 S 的转移概率测度;r 是一步报酬函数,即是从 K 到 $\mathbf{R}$ 的可测函数;

$V_\beta(\pi, i)$ 由1.4节的式(1-2)定义,

$$V_\beta^*(i) = \sup_{\pi\in\Pi} V_\beta(\pi, i) \qquad (i\in S).$$

3.6.1　最优性条件

对于模型式(3-18),为保证最优策略的存在,需对其作如下最优性条件的要求.

假设 A:

1° 对于任意 $i \in S, A(i)$ 是紧集;

2° r 有界,即存在 $M > 0, \forall k \in K. |r(k)| \leqslant M$,且对于每个 $i \in S, r(i,a)$ 是 $a(a \in A(i))$ 的连续函数;

3° 对于每个 $i \in S$ 及每个可测函数(从 S 到 $\mathbf{R}$)$V(y)$,$\int_{\mathbf{R}} V(y)q(\mathrm{d}y \mid i,a)$ 是 a 的连续函数.

对于模型式(3-18),在以上假设 A 的条件下,本章定理 1 ~ 定理 10 的结论仍然保持.现择其重要叙述如下,并作些补充.

设 Z 为博雷尔空间,记

$$B(X) = \{u: u: X \to \mathbf{R} \text{ 可测,有界}\}.$$

$$\Phi(i,a) = r(i,a) + \beta\int_S V_\beta^*(y)q(\mathrm{d}y \mid i,a) - V_\beta^*(i) \quad (\forall i \in S). \tag{3-19}$$

任给 $u \in B(S), f \in F$,定义 T_f 算子及 T 算子如下:

$$\begin{cases} \mathrm{T}_f u(i) = r(i,f(i)) + \beta\int_S u(y)q(\mathrm{d}y \mid i,f(i)) & (i \in s), \\ \mathrm{T}u(i) = \max\limits_{f(i)\in A(i)} \mathrm{T}_f u(i) = \max\limits_{a\in A(i)}\{r(i,a) + \beta\int_S u(y)q(\mathrm{d}y \mid i,a)\}. \end{cases} \tag{3-20}$$

3.6.2　折扣最优策略的重要性质

定理 17

1° $\boldsymbol{V}_\beta^*$ 是最优方程 $\mathrm{T}u = u$ 在 $B(S)$ 上的唯一解;

2° f^∞ 是最优的,当且仅当 $\mathrm{T}_f\boldsymbol{V}_\beta^* = \boldsymbol{V}_\beta^*$;

3° $\sup\limits_{a\in A(i)} \Phi(i,a) = 0$;

4° f^∞ 是最优的,当且仅当

$$\Phi(i,f(i)) = 0 \qquad (\forall i \in S).$$

3.6.3　渐近折扣最优策略

定义3　若对于每个 $i \in S$、策略 $\pi \in \Pi$ 满足

$$\lim_{n\to\infty} | V_n(\pi,i) - E^\pi(V_\beta^*(X_n) \mid X_0 = i) | = 0, \tag{3-21}$$

其中

$$V_n(\pi,i) = E^\pi\Big(\sum_{t=n}^{\infty}\beta^{t-n} R_t \mid X_0 = i\Big), \tag{3-22}$$

则称 π 是**渐近折扣最优策略**.

3.6.4　渐近折扣最优与 $\Phi(i,a)$ 的关系

由式(3-19)可得,对于任意 $i \in S, \pi \in \Pi$,有

$$\Phi(i_t,a_t) = E_i^\pi\{r(i_t,a_t) + \beta V_\beta^*(i_{t+1}) - V_\beta^*(i_t) \mid h_t, a_t\}, \tag{3-23}$$

其中 $E_i^\pi(\cdot) = E^\pi(\cdot \mid X_0 = i), X_t = i_t, \Delta_t = a_t$,表示 t 时段的状态及采取的行动,

且

$$\sum_{t=n}^{\infty}\beta^{t-n}E_i^{\pi}\ \Phi(i_t,a_t)=V_n(\pi,i)-E_i^{\pi}V_\beta^*(i_n)\qquad(\forall t\geqslant n).\quad(3\text{-}24)$$

定理18　策略 $\pi\in\Pi$ 是渐近折扣最优的，当且仅当 $t\to\infty$ 时，

$$\Phi(i_t,a_t)\xrightarrow{P_i^{\pi}}0\qquad(\forall i\in S).$$

即 $\forall\varepsilon>0$，

$$\lim_{t\to\infty}p^{\pi}(|\Phi(i_t,a_t)|<\varepsilon\mid X_0=i)=1\qquad(\forall i\in S).\qquad(3\text{-}25)$$

3.6.5　逐次逼近法与渐近折扣最优策略

定义4　设 $(f_t,t\geqslant 0)\in\Pi_m^d$，其中 $f_t\in F,t\geqslant 0$.

1° 称 $(f_t,t\geqslant 0)$ 是渐近折扣最优，若对于每个 $i\in S$，均有 $\lim_{t\to\infty}\Phi(i,f_t(i))=0$，其中 $\Phi(i,a)$ 由式(3-19)给出.

2° 称 $(f_t,t\geqslant 0)$ 是**一致渐近折扣最优**，若对于每个 $i\in S$，均有 $\lim_{t\to\infty}\sup_{i\in S}|\Phi(i,f_t(i))|=0$.

3° 设任取 $v_0^*\in B(S)$，令 $v_n=\mathrm{T}v_{n-1},n\geqslant 1$，称 $\{v_n,n\geqslant 0\}$ 为值迭代函数序列(逐次逼近).

定理19　任取 $v_0\in B(S)$，设 $\{v_n,n\geqslant 1\}$ 是值迭代函数序列，令 f_n 满足

$$v_n=\mathrm{T}v_{n-1}=\mathrm{T}_{f_n}v_{n-1}.$$

即 $\forall i\in S$，有

$$\begin{aligned}v_n(i)&=r(i,f_n(i))+\beta\int_{\mathbf{R}}v_{n-1}(y)q(\mathrm{d}y\mid i,f_n(i))\\&=\max_{a\in A(i)}\{r(i,a)+\beta\int_{\mathbf{R}}v_{n-1}(y)q(\mathrm{d}y\mid i,a)\}\quad(n\geqslant 1),\end{aligned}\qquad(3\text{-}26)$$

则 $\{f_t,t\geqslant 0\}$ 是渐近折扣最优的.

推论1　设 $A(i)$ 是 A 的紧子集(对于每一个 $i\in S$)，则必存在一马氏决定性策略 $(f_t,t\geqslant 0)$ 是渐近折扣最优的.

3.7　MDP 序列的逼近问题

设 $\{(S,A,q_t,r_t),t\geqslant 0\}$ 是一 MDP 序列，其中对于给定 $t\geqslant 0$，模型 (S,A,q_t,r_t) 满足 3.6.1 小节的最优性条件(假设 A). 本节讨论它们“收敛”到 MDP 模型 (S,A,q,r) 的有关问题.

值得说明的是，MDP 中的逼近有许多不同的方法与意义，本节的“收敛”问题主要为下节讨论自适应 MDP 的优化问题作准备.

3.7.1　收敛性条件

假设 B：

令 $\rho(t) = \sup_k |r_t(k) - r(k)|$，　$\nu(t) = \sup_k \| q_t(\cdot | k) - q(\cdot | k) \|$，

则有

$$\lim_{t\to\infty}\rho(t) = 0, \quad \lim_{t\to\infty}\nu(t) = 0.$$

注意：以上假设等价于

$$\bar{\rho}(t) = \sup_{s\geq t}\rho(s) \to 0, \quad \bar{\nu}(t) = \sup_{s\geq t}\nu(s) \to 0 \qquad (t\to\infty).$$

3.7.2　非平稳值迭代

定义5　对于每个 $k = (i,a) \in K$ 和 $v \in B(S)$，记

$$L_t(k,v) = r_t(k) + \beta\int_{\mathbf{R}} v(y) q_t(\mathrm{d}y \mid i,a). \tag{3-27}$$

算于 $T_t v = \max_{a\in A(i)} L_t(i,a,v)$，$\forall i \in S, v \in B(s)$. T_t 与式(3-20)中的算子T相同，是压缩算子，即有

$$\| T_t u - T_t v \| \leqslant \beta \| u - v \| \qquad (\forall u, v \in B(s)).$$

于是，可给出三种**非平稳值迭代**(简记NVI)：

1° NVI-1　给定 t，设 v_t^* 是 $B(S)$ 上 T_t 的唯一不动点，即

$$v_t^* = T_t v_t^*, \tag{3-28}$$

且 $\delta^* = \{f_t^*, t\geqslant 0\}$ 满足 $f_t^* \in F$，$f_t^*(i)$ 使式(3-28)右边达最大，即

$$v_t^*(i) = L_t(i, f_t^*(i), v_t^*) \qquad (t\geqslant 0, \forall i\in S).$$

或者说，对于每一个 $t\geqslant 0$，$f_t^*(\infty)$ 是 t-MDP 的最优策略.

2° NVI-2　对于每一个 $t\geqslant 0$，有 $\bar{V}_t \in B(S)$，

$$\bar{V}_t(i) = T_t\bar{V}_{t-1}(i) = \max_{a\in A(i)} L_t(i,a,\bar{V}_{t-1}) \qquad (\forall i\in S), \tag{3-29}$$

其中约定 $\bar{V}_{-1}(i) = 0$，且 $\bar{\delta} = (\bar{f}_t, t\geqslant 0)$，满足 $\bar{f}_t(i)$ 使式(3-29)右边达最大，即对于每一个 $i\in S$，

$$\bar{V}_t(i) = L_t(i, \bar{f}_t(i), \bar{V}_{t-1}) \qquad (t\geqslant 0).$$

3° NVI-3　设 $\{u_t, t\geqslant 0\}$，$u_t \in B(S)$ 满足

$$\lim_{t\to\infty} \| u_t - v_t^* \| = 0, \tag{3-30}$$

其中 v_t^* 满足式(3-28). 令序列 $\{\varepsilon_t, t\geqslant 0\}$，$\varepsilon_t > 0$. 单调减，且 $\varepsilon_t \to 0 (t\to\infty)$. 记

$$A_t(i) = \{a : a\in A(i), 且\ L_t(i,a,u_t) \geqslant T_t u_t(i) - \varepsilon_t\}$$
$$(i\in S, t\geqslant 0),$$
$$\delta' = (f'_t, t\geqslant 0),$$

其中 $f_t: S\to A$ 可测，且满足对于每一个 $i\in S$，$f'_t(i) \in A_t(i)$.

定理20　保持3.7.1小节的假设B.

1° 对于 $t\geqslant 0$，有

①　$$\| v_t^* - v^* \| \leqslant c_1 \max\{\rho(t), \nu(t)\},$$

其中 $c_1 = (1 + \beta c_0)(1-\beta)^{-1}$；$c_0 = M(1-\beta)^{-1}$.

② $\|\bar{V}_t - V\| \leqslant c_2\max\{\bar{\rho}([t/2]), \bar{\nu}([t/2]), \beta^{[t/2]}\}$.

其中$[c]$表不超过 c 的最大整数；$c_2 = 2c_0 + c_1$.

③ $\|u_t - v^*\| \leqslant \|u_t - v_t^*\| + \|v_t^* - v^*\| \to 0(t \to \infty)$.

2° $\delta^* = (f_t^*, t \geqslant 0), \bar{\delta} = (\bar{f}_t, t \geqslant 0), \delta' = (f'_t, t \geqslant 0)$ 均是模型 MDP(S, A, q, r) 的一致渐近最优策略.

3.8　自适应 MDP 模型

一个依赖于未知参数 θ 的 MDP 模型(S, A, q, r)，称为自适应 MDP，简记为 θ-MDP，对于这种控制决策问题，通常采取估计与决策交互进行的办法来解决. 这种估计与决策交互进行的步骤如下.

在 t 时段，将系统运行的信息 h_t(或其他有关信息) 对未知参数 θ 作出估计，记 $\hat{\theta}_t = \theta_t$；由此估计 $q(\theta), r(\theta)$，分别记为 $q(\theta_t), r(\theta_t)$；然后根据 θ_t-MDP 模型$(S, A, q(\theta_t), r(\theta_t))$ 作出决策 f_t.

到 $t+1$ 时段，将 h_t 加进新的信息后得到 h_{t+1}，再对 θ 作出新的估计，记$\hat{\theta}_{t+1} = \theta_{t+1}$；根据 θ_{t+1}-MDP 模型作出决策 f_{t+1}.

如此重复下去，直到$\{\theta_t, t \geqslant 0\}$ 在满足一定的条件下，使策略$(f_t, t \geqslant 0)$，对于给定的 θ-MDP 而言，达到某种意义下渐近最优为止.

3.8.1　θ-MDP 的记号

对于模型(S, A, q, r) 原有的记号 $q(\cdot \mid k), r(k), V_\beta(\pi, i), V_n(\pi, i), V_\beta^*, P_i^\pi$ $E_i^\pi T_f, T, \rho(t), \nu(t), \cdots$ 在 θ-MDP 模型$(S, A, q(\theta), r(\theta))$($\theta$ 固定) 中，可分别记为

$$q(\cdot \mid k, \theta), r(k, \theta), V_\beta(\pi, i, \theta), V_n(\pi, i, \theta),$$
$$V_\beta^*(\theta), P_i^{\pi;\theta}\ E_i^{\pi;\theta}\ T_f(\theta), T(\theta), \rho(t, \theta), \nu(t, \theta)\cdots$$

3.8.2　θ-MDP 模型$(S, A, q(\theta), r(\theta))$ 的基本假设和基本结论

定义6　设 Θ 是博雷尔空间，对于 $\theta \in \Theta$，称$(S, A, q(\theta), r(\theta))$ 为**自适应 MDP**，记为 θ-MDP. 对于每个固定 $\theta \in \Theta$，θ-MDP 模型满足以下假设 C.

假设 C：

1° 对于每一个 $i \in S$，$A(i)$ 是 A 的紧子集；

2° $r(k, \theta)$ 是从 $K\Theta$ 到 $\mathbf{R}$ 的可测函数，对于任意 $k \in K$ 及$\theta \in \Theta$，$|r(k, \theta)| \leqslant M$，且对于每个给定 $i \in S, \theta \in \Theta, r(i, a, \theta)$ 是 a 的连续函数.

3° $q(\cdot \mid k, \theta)$ 是给定 $K\Theta$，在 S 上的随机核，即给定$(k, \theta) \in K\Theta$，$q(\cdot \mid k, \theta)$ 是 S 上的条件概率测度；给定 $y \in S$，$q(y \mid \cdot, \cdot)$ 是从 $K\Theta$ 到$[0,1]$ 的可测函数，且满足对于任意 $v \in B(S), i \in S, \theta \in \Theta$，

$$\int v(y, \theta) q(\mathrm{d}y \mid i, a)$$

是 a 的连续函数.

在假设 C 成立条件下,3.6 节中的全部结果对于每一个 $\theta\in\Theta$ 的 $(S,A,q(\theta),r(\theta))$ 模型均成立. 主要结果如下.

定理21 在假设 C 成立条件下,

1° $V_\beta^*(\theta)$ 是最优方程 $V_\beta^*(\theta)=\mathrm{T}(\theta)V_\beta^*(\theta)$ 在 $B(S\Theta)$ 上的唯一解;或等价于,对于每个 $i\in S$ 及 $\theta\in\Theta$,

$$\max_{a\in A(i)}\Phi(i,a,\theta)=0,$$

其中

$$\Phi(i,a,\theta)=r(i,a,\theta)+\beta\int_R V_\beta^*(y,\theta)q(\mathrm{d}y\mid i,a,\theta)-V_\beta^*(i,\theta).$$

2° 对于每一个 $\theta\in\Theta$,给定 $f^*(\cdot,\theta)\in F$,当且仅当 $\Phi(i,f^*(i,\theta),\theta)=0$ 时,对于每一个 $i\in S$,$f^*(\theta)$ 是 θ-MDP 模型折扣最优策略,即 $V_\beta^*(\theta)=T_{f^*}(\theta)V_\beta^*(\theta)$.

3° 当且仅当 $\forall\varepsilon>0$,对于每一个 $i\in S$,有

$$\lim_{t\to\infty}p_i^{\pi,\theta}(|\Phi(i_t,a_t,\theta)|<\varepsilon)=1$$

时,一个策略 $\pi\in\Pi$,对于 θ-MDP 模型是渐近折扣最优策略.

3.8.3 非平稳值迭代

若 θ 是真值,但却是未知的参数,则可以用与 3.7 节中相类似的非平稳值迭代法求关于 θ-MDP 的最优值函数 $V_\beta^*(\theta)$,及渐近折扣最优策略.

设 $\theta_t=\hat{\theta}_t$ 是 t 阶段对 θ 的估计,且当 $t\to\infty$ 时,$\theta_t\to\theta$. 令

$$r_t(k)=r(k,\theta_t),\quad q_t(\cdot\mid k)=q(\cdot\mid k,\theta_t),$$

$$\rho(t,\theta)=\sup_k|r(k,\theta_t)-r(k,\theta)|\qquad(\theta_t,\theta\in\Theta,t\geqslant0),$$

$$v(t,\theta)=\sup_k\|q(\cdot\mid k,\theta_t)-q(\cdot\mid k,\theta)\|'\qquad(\theta_t,\theta\in\Theta,t\geqslant0),$$

$$\bar{\rho}(t,\theta)=\sup_{s\geqslant t}\rho(s,\theta),\quad\bar{v}(t,\theta)=\sup_{s\geqslant t}v(s,\theta).$$

假设 D:

当 $t\to\infty$ 时,对于任意 $\theta\in\Theta,\theta_t\to\theta,\rho(t,\theta)\to0,v(t,\theta)\to0$.

对于给定 $\theta,\theta_t,t\geqslant0$,在 $B(S\Theta)$ 上定义算子 $\mathrm{T}(\theta)$ 及 T_t 如下:

设 $v(i,\theta)\in B(S\Theta)$,

$$\mathrm{T}(\theta)v(i,\theta)=\max_{a\in A(i)}L(i,a,\theta,v).\tag{3-31}$$

其中

$$L(k,\theta,v)=r(k,\theta)+\beta\int_{\mathbf{R}}v(y,\theta)q(\mathrm{d}y\mid k,\theta)\qquad(k=(i,a)\in K),$$

$$\mathrm{T}_t\overset{\text{def}}{=\!=}\mathrm{T}(\theta_t),L_t(k,v)\overset{\text{def}}{=\!=}G(k,\theta_t,v).$$

即

$$\begin{aligned}\mathrm{T}_tv(i)&=\max_{a\in A(i)}L_t(i,a,v)\\&=\max_{a\in A(i)}\{r(i,a,\theta_t)+\beta\int_{\mathbf{R}}v(y)q(\mathrm{d}y(i,a,\theta_t)\}.\end{aligned}\tag{3-32}$$

按上述记号,3.7.2 小节中的 NVI 改为:

1° NVI-1 对于每一个 $t\geqslant 0$,令 $v_t^*(\cdot)=v^*(\cdot,\theta_t)$是 T_t 的不动点,策略 $\delta_\theta^*=(f_t^*,t\geqslant 0)$,其中 $f_t^*\in F$ 满足$f_t^*(\cdot)=f^*(\cdot,\theta_t)$,使式(3-31)右边达最大,即

$$v^*(i,\theta_t)=L_t[i,f^*(i,\theta_t),v^*(\cdot,\theta_t)].$$

2° NVI-2 对于每一个 $t\geqslant 0$,令 $\bar V_t(\cdot)=\bar V_t(\cdot,\theta_t)$是在 $B(S\Theta)$上且由递推方程 $V_t=T_t\bar V_{t-1}$定义的,即对于每个 $i\in S,t\geqslant 0$,

$$\bar V_t(i,\theta_t)=T_tV_{t-1}(i,\theta_{t-1})=\max_{i\in A(i)}\{r(i,a,\theta_t)+\beta\int_R\bar V_{t-1}(y,\theta_{t-1})q(dy\mid i,a,\theta_t)\}. \tag{3-33}$$

其中约定 $\bar V_{-1}(\cdot)=0$. 令

$$\bar\delta_\theta=(\bar f_q,t\geqslant 0),$$

其中$f_t(\cdot)=\bar f_t(\cdot,\theta_t)\in F$,且对于每个 $i\in S$ 及 $t\geqslant 0,\bar f_t(i)$使式(3-33)右边达最大.

注意:V_t 与$\bar f_t$ 不仅依赖于θ_t,也依赖于 $\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_{t-1}$,然而仍简记为 $\bar v_t(i,\theta_t)$和 $\bar f_t(i,\theta_t)$.

3° NVI-3 令 $u_t(\cdot)=u_t(\cdot,\theta_t)\in B(S\Theta)$,满足

$$\lim_{t\to\infty}\|u_t(\cdot,\theta_t)-v^*(\cdot,\theta_t)\|=0.$$

令$\{\varepsilon_t,t\geqslant 0\}$为正的单调递降序列,且 $\varepsilon_t\to 0,t\to\infty$时,对于每个 $i\in S$ 及$t\geqslant 0$,令

$$A_t(i)=\{a:a\in A(i),L(i,a,\theta_t,u_t)\geqslant T_tu_t(i)-\varepsilon_t\},$$

策略

$$\delta'=(f'_t,t\geqslant 0),$$

其中$f'_t(\cdot)=f'_t(\cdot,\theta_t)$是从 S 到A 的可测映射,且对于 $a\in A(i)$及 $t\geqslant 0$,有$f'_t(i)\in A_t(i)$.

对应于 3.7 节的定理 20,在自适应 θ-MDP 模型中的非平稳值迭代,有以下结论.

定理22 在假设 C 及假设 D 成立条件下,若$\lim\limits_{t\to\infty}\theta_t=\theta$,则

1° $\lim\limits_{t\to\infty}\|v^*(\theta_t)-v^*(\theta)\|=0$, $\lim\limits_{t\to\infty}\|\bar V_t(\theta_t)-v^*(\theta)\|=0$,

$$\lim_{t\to\infty}\|u_t(\theta_t)-v^*(\theta)\|=0;$$

2° 定理 20 的 1°中的不等式仍保持(只须将符号作相应的替换);

3° 当$t\to\infty$时,

$$\sup_i|\Phi(i,f^*(i,\theta_t),\theta)|\to 0,$$

$$\sup_i|\Phi(i,\bar f_t(i,\theta_t),\theta)|\to 0,$$

$$\sup_i|\Phi(i,f'_t(i,\theta_t),\theta)|\to 0.$$

即 $\delta_\theta^*=(f_t^*,t\geqslant 0)$、$\bar\delta_\theta=(\bar f_t,t\geqslant 0)$及 $\delta'_\theta=(f'_t,t\geqslant 0)$关于 θ-MDP 模型均是一致渐近折扣最优策略.

3.8.4 自适应策略

粗略地说,如果一个策略是由参数估计与控制决策组合而成的策略,那么就称

之为**自适应策略**.严格的定义如下.

需要首先说明的是,在统计中对于估计参数,有许多方法使其估计的性质具有稳健性,在此仅以强相合估计情况来说明自适应估计.

定义7 给定 $t\geqslant 0$,$\hat{\theta}_t=\hat{\theta}_t(h_t)$是 H_t 到 Θ 的可测函数,若一序列$\{\hat{\theta}_t, t\geqslant 0\}$与 $\theta\in\Theta$ 满足:对于给定策略 $\delta\in\Pi$ 及每一个 $i\in S$,有

$$P_i^{\delta,\theta}(\lim_{t\to\infty}\hat{\theta}_t=\theta)=1,$$

即 $t\to\infty$ 时,$\hat{\theta}_t$ 在 $P_i^{\delta,\theta}$ 下几乎处处收敛于 θ,则称$\{\hat{\theta}_t, t\geqslant 0\}$是参数 θ 的**强相合估计**.

设 $\theta\in\Theta$,$\delta_\theta^*=(f_t^*, t\geqslant 0)$,$\bar{\delta}_\theta=(\bar{f}_t, t\geqslant 0)$,$\delta'_\theta=(f'_t, t\geqslant 0)$分别由 3.8.3 小节的 NVI-1、NVI-2 和 NVI-3 定义,$\hat{\theta}_t$ 是 H_t 到 Θ 的可测函数.则有如下的定义.

定义8 令 $\delta^*=(\delta_t^*, t\geqslant 0)$,其中 $\delta_t^*(h_t)=f_t^*(i_t,\hat{\theta}_t(h_t))$,$\forall h_t\in H_t$,$i_t\in S$,$t\geqslant 0$,则称 δ^*是非平稳估计与控制原理的自适应策略;

令 $\bar{\delta}=(\bar{\delta}_t, t\geqslant 0)$,其中 $\bar{\delta}_t(h_t)=\bar{f}_t(i_t,\hat{\theta}_t(h_t))$,$\forall h_t\in H_t$,$i_t\in S$ 及 $t\geqslant 0$,则称 $\bar{\delta}$是非平稳估计与控制原理自适应策略;

令 $\delta'=(\delta'_t, t\geqslant 0)$,其中 $\delta'_t(h_t)=f'_t(i_t,\hat{\theta}_t(h_t))$,$\forall h_t\in H_t$,$i_t\in S$ 及 $t\geqslant 0$,则称 δ'是修正的非平稳估计与控制原理自适应策略.

定理23 若假设 C 及假设 D 成立,且$\{\hat{\theta}_t, t\geqslant 0\}$是 θ 的强相合估计,则自适应策略 δ^*,$\bar{\delta}$和 δ'均是关于θ-MDP模型的渐近折扣最优策略.

4 平均模型

4.1 概 述

4.1.1 定义

定义1 称$\{S, A, q, r, V_a\}$为平均模型,目标函数 V_a 表示长期运行单位平均期望报酬.给定 $\pi\in\Pi$,$i\in S$.$V_a(\pi,i)$由 1.4 节的式(1-3)给出,$V_a(\pi)=(v_a(\pi,i), i\in S)^T$($S$ 为可数集).对于 $\pi^*\in\Pi$,若对于任意 $\pi\in\Pi$,均有 $V_a(\pi^*)\geqslant V_a(\pi)$,则称 π^*是关于平均准则的最优策略.

4.1.2 基本假设

本章第 4.1 节到第 4.7 节均假设决策函数集 F 为有限集.

4.1.3 预备知识

对于平均模型在 F 为有限时，要用以下预备知识.

引理1　令 $Q=[q_{ij}]$ 是 $l\times l$ 的随机矩阵，Q^m 是 Q 的 m 次幂，则

1° $\lim\limits_{n\to\infty}\left(\frac{1}{n}\sum\limits_{m=0}^{n-1}Q^m\right)=Q^*$ 存在，且 Q^* 亦是随机矩阵，满足

$$QQ^*=Q^*Q=Q^*Q^*=Q^*,\tag{4-1}$$

还有

$$\lim_{\beta\uparrow 1}(1-\beta)\sum_{m=0}^{\infty}\beta^m Q^m=Q^*.\tag{4-2}$$

2° $[I-(Q-Q^*)]^{-1}$ 存在.

3° 令

$$H(\beta)=\sum_{m=0}^{\infty}\beta^m(Q^m-Q^*),$$

$$H=[I-(Q-Q^*)]^{-1}-Q^*,\tag{4-3}$$

则

$$\lim_{\beta\uparrow 1}H(\beta)=H,$$

且满足

$$H(\beta)Q^*=Q^*H(\beta)=HQ^*=Q^*H=0,\tag{4-4}$$

$$(I-Q)H=H(I-Q)=I-Q^*.\tag{4-5}$$

4° 对于每一个 l 维向量 C，方程组

$$QX=X,\quad Q^*X=Q^*C,\tag{4-6}$$

有唯一解 Q^*C.

4.2 平稳最优策略的存在性

对于 F 为有限集的情形，可以通过折扣模型当 $\beta\uparrow 1$ 时的极限，并利用以上预备知识，证明得到以下结果.

定理1　对于折扣准则，存在 $\beta_0\in(0,1)$（β_0 充分接近于 1），及一个 $f^*\in F$，使得

$$V_\beta(f^{*\infty})=\sup_{\pi\in\Pi}V_\beta(\pi)=V_\beta^*,$$

对于所有 $\beta\in(\beta_0,1)$ 均成立.

注意：对于折扣模型，当 β 取不同值时，通常其最优策略 $f_\beta^{*\infty}$ 依赖于 β；然而在 F 为有限集时，定理 1 说明对于充分接近于 1 的 β，即 $\beta\in(\beta_0,1)$，存在一个共同的最优策略 $f^{*\infty}$.

定理2　若 $f^*\in F$ 同定理 1 中所定义，则策略 $f^{*\infty}$ 是平均准则最优策略，即 $\forall\pi\in\Pi$，有

$$V_a(f^{*\infty})\geqslant V_a(\pi).$$

定理 2 说明，在 F 为有限集时，必存在平稳最优策略. 当 F 为无限集时，情况要复杂得多.

4.3 平均期望报酬与折扣期望报酬的关系

对于任意 $f\in F$,记

$$Q(f)=[q(j\mid i,f(i))],$$

$$Q^*(f)=\lim_{n\to\infty}(\sum_{m=0}^{n-1}Q(f)^m),$$

$H(\beta,f)$, $H(f)$是分别用 $Q(f)$, $Q^*(f)$代替 Q, Q^*,并由式(4-3)给出的矩阵.

由阿贝尔(Abel)定理可知,

$$\lim_{\beta\uparrow 1}(1-\beta)\sum_{m=0}^{\infty}\beta^m\theta(f)^m=\theta^*(f),$$ 从而有如下定理.

定理3 对于任给的 $f\in F$,有

1° $$V_a(f^\infty)=\lim_{\beta\uparrow 1}(1-\beta)V_\beta(f^\infty). \tag{4-7}$$

2° $$V_a(f^\infty)=Q^*(f)r(f). \tag{4-8}$$

定理4 对于任给的 $f\in F$,

$$V_\beta(f^\infty)=(1-\beta)^{-1}V_a(f^\infty)+H(f)r(f)+\varepsilon(\beta,f), \tag{4-9}$$

其中 $V_a(f)$是方程

$$[I-Q(f)]V=0,\quad Q^*(f)V=Q^*(f)r(f) \tag{4-10}$$

的唯一解,$H(f)r(f)=V(f)$是方程

$$[I-Q(f)]V=r(f)-V_a(f^\infty),\quad Q^*(f)V=0 \tag{4-11}$$

的唯一解;而 $\varepsilon(\beta,f)=(H(\beta,f)-H(f))r(f)$且 $\lim_{\beta\uparrow 1}\varepsilon(\beta,f)=0$.

4.4 策略改进法

4.4.1 策略改进方法依据

对于任给的 $f\in F$,如何寻找比策略 f^∞ 更好的策略 g^∞ 呢? 引入如下定义.

定义2 对于任给的 $f\in F$,记

$$G(f,i)=\{a:a\in A(i),\sum_{j\in S}q(j\mid i,a)V_a(f^\infty,j)>V_a(f^\infty,i)$$

或
$$\sum_{j\in S}q(j\mid i,a)V_a(f^\infty,j)=V_a(f^\infty,i)$$

且
$$r(i,a)+\sum_{j\in S}q(j\mid i,a)v_j(f)-V_a(f^\infty,i)>v_i(f)\}\qquad(i\in S),$$

其中 $v_i(f)$是向量 $v(f)=H(f)r(f)$的第 i 个分量.

定义3 对于任给的 $f\in F$,定义新的 $g\in F$,为

$$g(i)=\begin{cases}a & (a\in G(f,i),\text{若 } G(f,i)\neq\varnothing,i\in S),\\ f(i) & (\text{若 } G(f,i)=\varnothing,i\in S).\end{cases} \tag{4-12}$$

定理5 对于任给的 $f\in F$, g 由式(4-12)定义.若 $f\neq g$,则 $V_a(f^\infty)\leqslant V_a(g^\infty)$,

且对于充分接近于 1 的 β,均有 $V_\beta(f^\infty)\leqslant V_\beta(g^\infty)$,对于 $g(i)\neq f(i)$的 i,不等式 $V_\beta(f^\infty\leqslant V_\beta(g^\infty)$的第 i 个分量严格不等式成立,即 $V_\beta(f^\infty,i)<V_\beta(g^\infty,i)$.

定义 4　对于任给的 $f\in F$,经由式(4-12)得到的 $g\in F$,称为一次策略改进迭代.

定理 6　经有限次策略改进迭代,必能找到平均准则的最优平稳策略.

4.4.2　策略改进算法的计算步骤

(1)任取 $f\in F$.

(2)策略求值运算.求$\{V_a(f^\infty),\nu(f)\}$,其中 $V_a(f^\infty)=Q^*(f)r(f)$, $\nu(f)$是方程组

$$(I-Q(f))\nu(f)=r(f)-V_a(f^\infty),Q^*(f)\nu(f)=0$$

的唯一解;或直接求

$$\nu(f)=H(f)r(f)=[r-Q(f)+Q^*(f)]^{-1}r(f)-V_a(f^\infty).$$

(3)策略改进运算.对于求出的$\{V_a(f^\infty),V(f)\}$,按式(4-12)定义 $g\in F$.若 $g=f$,则终止迭代,f^∞即是最优策略;若 $g\neq f$,则以 g 代替f转入步骤(2).

4.5　线性规划法

用线性规划方法求解最优值函数及最优策略的步骤是:

(1)先给出 LP 的原问题.设定$\{a_i,i\in S\}$, $a_i>0$, $\sum_{i\in S}a_i=1$.寻求$\{V_a(i),i\in S\}$使

(P)
$$\min\sum_{i\in S}a_iV_a(i)$$

满足约束

$$\begin{cases}\sum_{j\in S}V_a(j)(\delta_{ij}-q(j\mid i,a))+V_a(i)\geqslant r(i,a) & (a\in A(i),i\in S),\\ \sum_{j\in S}(\delta_{ij}-q(j\mid i,a))V_a(j)\geqslant 0 & (a\in A(i),i\in S).\end{cases}$$

可以用单纯形方法求解以上(P)问题.

(2)求(P)问题的对偶问题,即寻找变量$\{x_{ia},y_{ia},a\in A(i),i\in S\}$,使

(D)
$$\max\sum_{i\in S}\sum_{a\in A(i)}x_{ia}r(i,a)$$

满足约束

$$\begin{cases}x_{ia}\geqslant 0,y_{ia}\geqslant 0 & (a\in A(i),i\in S),\\ \sum_{i\in S}\sum_{a\in A(i)}x_{ia}(\delta_{ij}-q(j\mid i,a))=0 & (i\in S),\\ \sum_{a\in A(j)}x_{ja}+\sum_{i\in S}\sum_{a\in A(i)}y_{ia}(\delta_{ij}-q(j\mid i,a))=a_j & (j\in S).\end{cases}$$

求出对偶规划(D),即可寻求平均准则最优策略.

定理7　设 $f^*\in F$,它是由问题(P)与问题(D)的最优解采取的行动定义的,则 $f^{*\infty}$关于平均准则是最优的.

4.6 不可约链的情形

一般地说，不同的策略，相应的马氏链状态的状态分类会有不同. 本节进一步假设：对于每个 $f^{\infty} \in \Pi_s^d$，其转移矩阵 $\boldsymbol{Q}(f)$ 对应的马氏链是不可约的，即对于每一个 f^{∞}，相应的马氏链的状态空间 S 组成不可分的常返类（由于 S 有限，必是一正常返类）. 在上述附加假设下，由马氏链的基本知识可知，对于任何 $f \in F$，对应于 $\boldsymbol{Q}(f)$ 的马氏链必存在唯一的平稳分布，记为 $\boldsymbol{q}(f) = (q_i(f), i \in S)$，且 $V_a(f^{\infty}, i) = \sum_{j \in S} q_j(f) r(i, f(j)) = V_f, i \in S$. 即 $V_a(f^{\infty}, i) = V_f$ 与 i 无关. 因此

$$\sum_{j \in S} q(j \mid i, a) V_a(f^{\infty}, j) = V_a(f^{\infty}, i) = V_f$$

恒成立. 故在此情形下，运用策略改进法时，在策略改进步骤中，$G(f, i)(i \in S)$ 的定义应改为

$$G(f, i) = \{a : a \in A(i), r(i, a) + \sum_{j \in S} q(j \mid i, a) v_j(f) - v_f > v_i(f)\} \quad (i \in S). \tag{4-13}$$

在策略求值步骤中只需改为求 $\{q_i(f), i \in S\}$ 及 $\{V_f, v_i, i \in S\}$ 即可，$\{q_i(f), i \in S\}$ 是方程组

$$\begin{cases} \boldsymbol{q}(f) = \boldsymbol{q}(f)\boldsymbol{Q}(f), \\ \boldsymbol{q}(f)\boldsymbol{e} = 1 \end{cases} \tag{4-14}$$

的唯一解，其中 $\boldsymbol{e} = (1, 1, \cdots, 1)^{\mathrm{T}}$ 是 l 维单位列向量，$\{V_f, v_i, i \in S\}$ 是方程组

$$\begin{cases} V_f + v_i = r(i, f(i)) + \sum_{j \in S} q(j \mid i, f(i)) v_j \qquad (i \in S), \\ \sum_{j \in S} q_j(f) v_j = 0 \end{cases} \tag{4-15}$$

的唯一解. 由上可知，策略迭代过程大为简化.

在不可链的情形下，线性规划算法改为

(P) $\min V$

服从约束

$$\sum_{j \in S} v_j(\delta_{ij} - q(j \mid i, a)) + V \geqslant r(i, a) \qquad (a \in A(i), i \in S), \tag{4-16}$$

其最优解 $\{V, v_i, i \in S\}$ 是 $V = V_{f^*}$，其中 $f^{*\infty}$ 是最优策略，$f^*(i) = a \in A(i)$ 是使式(4-16)等式成立的行动.

对偶问题(D)化为求变量 $\{x_{ia}, a \in A(i), i \in S\}$，使

(D) $\max \sum_{i \in S} \sum_{a \in A(i)} x_{ia} r(i, a)$

满足约束

$$\begin{cases} x_{ia} \geqslant 0, a \in A(i), i \in S, \sum_{i \in S} \sum_{a \in A(i)} x_{ia} = 1, \\ \sum_{i \in S} \sum_{a \in A(i)} x_{ia}(\delta_{ij} - q(j \mid i, a)) = 0 \qquad (j \in S). \end{cases} \tag{4-17}$$

$$r(1,a_2)+\sum_{j\in S}q(j\mid 1,a_2)v_j(f_1)-V_{f_1}$$

$$=6+0.5\times\frac{7}{1.8}-0.5\times\frac{14}{1.8}-\frac{5}{3}$$

$$=\frac{4.3}{1.8}<\frac{7}{1.8}=v_1(f_1),$$

故 $a_2\in G(f_1,1)$,即 $G(f_1,1)=\varnothing$.

又由 $f_1(2)=a_2\bar{\in}G(f_1,2)$,只需判断 a_1 是否属于 $G(f_1,2)$.

$$r(2,a_1)+q(\frac{1}{2},a_1)v_1(f_1)+q(\frac{2}{2},a_1)v_2(f_1)-\bar{V}_{f_1}$$

$$=-5+0.7\times\frac{7}{1.8}-0.3\times\frac{14}{1.8}-\frac{5}{3}$$

$$=-\frac{11.3}{1.8}>-\frac{14}{1.8}=v_2(f_1).$$

故 $a_1\in G(f_1,2)$,且 $G(f_1,2)=\{a_1\}$.因此 f_2^∞ 为一改进策略.以 f_2 代替 f_1 转入步骤(1).

(4) 对 f_2 作策略求值运算,由

$$\boldsymbol{Q}(f_2)=\begin{bmatrix}0.8&0.2\\0.7&0.3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{r}(f_2)=(4,-5)^{\mathrm{T}},$$

及 $\boldsymbol{q}(f_2)=\boldsymbol{q}(f_2)\boldsymbol{Q}(f_2),\boldsymbol{q}(f_2)e=1$,得

$$\boldsymbol{q}(f_2)=(\frac{7}{9},\frac{2}{9}).$$

对于 f_2,解方程式(4-15),得

$$\boldsymbol{v}(f_2)=(\frac{20}{9},-\frac{70}{9})^{\mathrm{T}},\quad V_{f_2}=V_a(f_2^\infty,i)=2,i\in S.$$

(5) 对 f_2 作策略改进运算,由

$$f_2(1)=a_1\bar{\in}G(f_2,1),$$

判断 a_2 是否属于 $G(f_2,1)$.

$$r(1,a_2)+\sum_j q(j\mid 1,a_2)v_j(f_2)-V_{f_2}=\frac{11}{9}<\frac{20}{9}=v_1(f_2).$$

故 $a_2\bar{\in}G(f_2,1)$,即 $G(f_2,1)=\varnothing$.

因 $f_2(2)=a_1\bar{\in}G(f_2,2)$,只需判断 a_2 是否属于 $G(f_2,2)$.

$$r(2,a_2)+\sum_j q(j\mid 2,a_2)v_j(f_2)-V_{f_2}=-\frac{79}{9}<-\frac{70}{9}=v_2(f_2).$$

故 $a_2\bar{\in}G(f_2,2)$,即 $G(f_2,2)=\varnothing$.

由此可知,f_2^∞ 对平均准则是最优策略.且 $\boldsymbol{V}_a=\boldsymbol{V}_a(f_2^\infty)=(2,2)^{\mathrm{T}}$.

4.7 不可约遍历链下的逐次逼近法

为简单计,本节附加假设:对于每个 $f\in F$,$\boldsymbol{Q}(f)$ 对应的马氏链是不可约遍历

链.

任取 l 维初始向量 $\boldsymbol{V}_0$,定义

$$\boldsymbol{V}_{n+1} = \max_{f\in F}\{\boldsymbol{r}(f) + \boldsymbol{Q}(f)\boldsymbol{V}_n\} \qquad (n \geqslant 0),$$

即

$$V_{n+1}(i) = \max_{a\in A(i)}\{r(i,a) + \sum_{j\in S} q(j\mid i,a)V_n(j)\} \qquad (i\in S, n\geqslant 1), \tag{4-18}$$

$$X_n(i) = V_{n+1}(i) - V_n(i) \qquad (i\in S, n\geqslant 0),$$
$$\boldsymbol{X}_n = (X_n(i), i\in S)^{\mathrm{T}}.$$

定理8　在本节附加假设下,对于$\{\boldsymbol{V}_n, \boldsymbol{X}_n, n\geqslant 0\}$,有

1°
$$V_n(i) = ng + v_i + \delta_n(i) \qquad (i\in S), \tag{4-19}$$

其中$\lim\limits_{n\to\infty}\delta_n(i) = 0, i\in S, g, \{v_i, i\in S\}$ 满足最优方程

$$v_i + g = \max_{a\in A(i)}\{r(i,a) + \sum_{j\in S} q(j\mid i,a)v_j\}, \tag{4-20}$$

及

$$g = \max_{f\in F} V_f = \max_{f\in F} V(f^\infty, i) \quad (\text{任给 } i\in S), \tag{4-21}$$

即 g 是每单位时间最大平均期望报酬.

2°
$$\lim_{n\to\infty} X_n(i) = g \qquad (\text{任给 } i\in S). \tag{4-22}$$

3° 令 $L''_n = \max\limits_{i\in S} X_n(i), L'_n = \min\limits_{i\in S} X_n(i)$,则

$$L'_n \leqslant L'_{n+1} \leqslant g \leqslant L''_{n+1} \leqslant L''_n \qquad (n\geqslant 0),$$

且

$$\lim_{n\to\infty} L'_n = g = \lim_{n\to\infty} L''_n.$$

4° 一个策略f^∞,若存在某个 $n_0 > 0$,对于所有 $n\geqslant n_0$,满足

$$V_{n+1}(i) = \max_{a\in A(i)}\{r(i,a) + \sum_{j\in S} q(j\mid i,a)V_n(j)\}$$
$$= r(i,f(i)) + \sum_{j\in S} q(j\mid i,f(i))V_n(j),$$

则

$$g = V_a(f^\infty, i) = V_a^*(i) \quad (\text{对任意 } i\in S),$$

即 f^∞ 是最优策略(关于平均准则).

4.8　博雷尔状态空间的平均模型

下面讨论状态空间 S 及行动集 A 均为博雷尔空间的平均模型(S, A, q, r, V_a). 参见 1.6 节,此时状态 - 行动对集$K = \{(x,a): x\in S, a\in A(x)\}$;$q$ 是给定$k\in K$,定义在 S 上的随机核,即 $\forall k\in K, q(\cdot\mid k)$ 是 S 上的概率测度;$\forall B\in\mathscr{B}(S), q(B\mid\cdot)$ 为从 K 到$[0,1]$的可测函数;一步报酬函数 r 是从K 到R 的可测函数.给定策略 $\pi\in\Pi$,从 $x\in S$ 出发的平均期望报酬

$$V_a(\pi, x) = \liminf_{n\to\infty} E_x^\pi\left(\frac{1}{n}\sum_{t=0}^{n-1} R_t\right) \qquad (x\in S).$$

4.8.1 基本假设

1° 对于每一个 $x \in S$, $A(x)$ 是 A 的一(非空)紧子集.

2° 对于所有 $k \in K$,均有 $|r(k)| \leq M$,且对于每一个 $x \in S$, $r(x,a)$ 是 $a(a \in A(x))$ 的连续函数.

3° 对于每一 $x \in S$ 及每一函数 $v \in \mathscr{B}(S)$, $\int v(y)q(\mathrm{d}y \mid x,a)$ 是 $a \in A(x)$ 的连续函数.其中 $\mathscr{B}(S)$ 为定义在 S 上的有界可测函数全体.

4° (遍历性条件)存在一状态 $x_0 \in S$ 及正数 α_0,满足对于所有 $k \in K$, $q(\{x_0\} \mid k) \geq \alpha_0$.

下面均在假设 1° ~ 4° 成立条件下进行讨论.

4.8.2 最优策略及最优值函数

定理9 在假设1° ~ 4° 成立条件下,若存在一常数 j^* 和函数 $V^* \in B(S)$,满足下列最优方程

$$j^* + v^*(x) = \max\{r(x,a) + \int_S v^*(y)q(\mathrm{d}y \mid x,a)\} \qquad (\forall x \in S), \tag{4-23}$$

则

1° $$\sup_{\pi \in \Pi} V_a(\pi,x) \leq j^* \qquad \forall x \in S.$$

2° 设 $f^* \in F$, $f^*(x) \in A(x)$, $\forall x \in S$, $f^*(x)$ 是使达到式(4-23)右边最大值的决策函数,即 $f^*(x) \in A(x)$ 满足

$$j^* + v^*(x) = r(x,f^*(x)) + \int v^*(y)q(\mathrm{d}y \mid x,f^*(x)) \qquad (\forall x \in S), \tag{4-24}$$

则 $f^{*\infty}$ 是平稳最优策略,且

$$V_a^*(x) = V_a(f^*,x) = j^* \quad (\forall x \in S).$$

3° $\forall \pi \in \Pi, x \in S$,

$$P^\pi\{\lim_{n\to\infty} n^{-1}\sum_{t=0}^{n-1} r(X_t,a_t) = j^* \mid X_0 = x\} = 1,$$

简记 $$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=0}^{n-1} r(X_t,a_t) = j^* \qquad (p_x^\pi - \text{a.s.}),$$

当且仅当

$$P^\pi\{\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=0}^{n-1}\Phi(X_t,a_t) = j^* \mid X_0 = x\} = 1 \qquad (\forall x \in S), \tag{4-25}$$

其中 $\Phi(x,a) = r(x,a) + \int_S v^*(y)q(\mathrm{d}y \mid x,a) - j^* - v^*(x)$ 是定义在 K 上的函数.

4° 若策略 $\pi \in \Pi$ 满足式(4-25),则 π 是最优策略.

注意：若$\{j^*, v^*(\cdot)\}$满足最优方程(简称 DE) 式(4-23)，则称$\{j^*, v^*(\cdot)\}$是 DE 的一个解.

DE 方程式(4-23) 可用 Φ 表示如下：

$$\max_{a\in A(x)} \Phi(x,a) = 0 \qquad (\forall x \in S).$$

式(4-23) 亦可写成如下形式：

$$\Phi(x, f^*(x)) = 0 \qquad (\forall x \in S). \tag{4-26}$$

由定理 9 的 2° 有如下推论.

推论1　设 $f^* \in F$ 满足式(4-26)，则 $f^{*\infty}$ 是最优策略.

如分别记 $q^t(\cdot \mid x, f(x))$ 和 P_x^f 为 t 阶段转移概率和概率测度，那么，由 4.8.1 小节遍历性假设 4° 可知，$\forall f \in F, h \in B(S)$，有

1° 存在唯一的不变概率测度 p^f，满足，

$$P^f(B) = \int_S q(B \mid x, f(x)) P^f(\mathrm{d}x) \qquad (\forall B \in \mathscr{B}).$$

2° $\lim\limits_{t\to\infty}\int h(y) q^t(\mathrm{d}y \mid x, f(x)) = \int_S h(y) p^f(\mathrm{d}y) \qquad (\forall x \in S).$

3° $V_a(f^\infty, x)$ 是一常数 $j(f)$，即

$$V_a(f^\infty, x) = \int_S r(y, f(y)) p^f(\mathrm{d}y) \xlongequal{\text{def}} j(f) \quad (\forall x \in S).$$

4.8.3　值迭代

$\forall v \in B(S), x \in S$，定义算子 $\mathrm{T}: B(S) \to B(S)$ 如下：

$$\mathrm{T}v(x) = \max_{a\in A(x)} \{r(x,a) + \int_S v(y) q(\mathrm{d}y \mid x, a)\}.$$

记

$$v_t \xlongequal{\text{def}} \mathrm{T}v_{t-1} = \mathrm{T}^t v_0,$$

其中 $v_0 \in B(S)$ 为任取，即

$$V_t(x) = \max_{a\in A(x)} \{r(x,a) + \int_S v_{t-1}(y) q(\mathrm{d}y \mid x, a)\} \qquad (\forall t \geqslant 1, x \in S), \tag{4-27}$$

$$V_t^+ = \sup_x (v_t(x) - v_{t-1}(x)),\ V_t^- = \inf_x (v_t(x) - v_{t-1}(x)) \qquad (\forall t \geqslant 1, x \in S). \tag{4-28}$$

任取 $f_0 \in F$，对于 $t \geqslant 1, f_t \in F, f_t(x) \in A(x)$，$f_t$ 是满足使式(4-27) 右边达最大的决策函数，即

$$v_t(x) = r(x, f_t(x)) + \int_S v_{t-1}(y) q(\mathrm{d}y \mid x, f_t(x)). \tag{4-29}$$

称　$\delta = (f_t, t \geqslant 0)$ 是值迭代策略.

记 $u_0 = 0$，对于 $t \geqslant 1, v \in B(S), x \in S$，定义算子 $\mathrm{Q}_t: B(S) \to B(S)$ 如下：

$$\mathrm{Q}_t v(x) = \max_{a\in A(x)} \{r(x,a) t^{-1} + (t-1) t^{-1} \int_S v(y) q(\mathrm{d}y \mid x, a)\}. \tag{4-30}$$

令 $u_t = \mathrm{Q}_t u_{t-1}, t \geqslant 1$，易知 Q_t 是压缩算子. 在 $B(S)$ 上有唯一不动点 $u_t^* \in B(S)$，

即

$$u_t^* = Q_t u_t^*.$$

定理10 若4.8.1小节假设1°～4°成立，则对于 $t \geqslant 1$，有

1° $$V_t^- \leqslant V_\alpha(f_t^\infty, x) \leqslant j^* \leqslant V_t^+,$$

且当 $t \to +\infty$ 时，

$$V_t^- \uparrow j^*, \quad V_t^+ \downarrow j^*, \quad \sup_x |V_\alpha(f_t^\infty, x) - j^*| \to 0.$$

2° 当 $t \to +\infty$ 时，
$$\sup_x |u_t(x) - j^*| \to 0,$$
$$\| u_t^* - u_t \| \to 0,$$
$$\sup_x |u_t^*(x) - j^*| \to 0.$$

注意：利用式(4-29)得到的策略 $\delta = (f_t, t \geqslant 0)$，可作为平均准则的"渐近最优策略".

5 最小风险模型

在 MDP 中，至今研究得较系统的模型是各种形式的以期望报酬为优化准则的模型.但由于期望准则对风险不敏感，以及许多决策者厌恶风险，因而它的应用受到限制.一般地，在复杂系统中，决策者要求各种指标的可靠度尽可能大；在网络中，决策者要求信号延迟、阻塞、丢失的概率尽量小；在金融、经济、工程与管理中，决策者要求各种效益性能指标未超过给定目标值的概率尽可能小.这样的决策问题要引入概率准则.因此研究概率准则模型有广泛的应用背景.本章下面选其中最基本的一类予以介绍.

5.1 概率准则 MDP 模型

5.1.1 报酬是随机变量的情形

考虑离散时间 MDP 模型

$$(S, A, q, g), \tag{5-1}$$

其中

(1) S 为系统状态空间，是可数集.

(2) $A = \bigcup_{i \in S} A(i)$ 为行动集，$A(i)$ 是 i 状态行动集.

(3) $q = \{q(j \mid i, a), i, j \in S, a \in A(i)\}$ 为系统转移律族，$q(j \mid i, a)$ 的含义同 1.1 节所定义.

(4) $g = \{G(\cdot \mid i, a, j): i, j \in S, a \in A(i)\}$ 为报酬分布律，

这里

$$G(B \mid i, a, j) = P(R_t \in B \mid i_t = i, a_t = a, i_{t+1} = j) \qquad (B \in \mathscr{B}(\mathbf{R})).$$

以 i_t, a_t, R_t 分别记 t 阶段的系统状态、采用的行动及得到的报酬. $G(\cdot \mid i, a, j)(i, j \in S, a \in A(i))$. 是处于状态 i、采用行动 a、下阶段处于状态 j 条件下报酬的分布函数. 假设 $G([M_1, M_2] \mid i, a, j) = 1$, 其中 $M_1 < M_2$ 是常数.

值得指出的是, 在 MDP 文献中, 通常假定报酬分布为退化分布, 即将 $G(\cdot \mid i, a, j)$ 假定是报酬函数 $r(i, a, j)$. 此时 $G(\{r(i, a, j)\} \mid i, a, j) = 1$. 这对于以期望报酬为优化准则的问题并不失一般性. 但对于以概率为准则的优化问题, 这样的假定却有失一般.

给定一个策略 $\pi = (\pi_t, t \geq 1)$(这里姑且同 1.2 节的定义, 本章策略的严格定义见5.2.2小节). 以 $B_n(\pi)$ 和 $B_\infty(\pi)$ 分别记在策略 π 下得到的有限阶段和无限阶段折扣总报酬, 即

$$\begin{cases} B_n(\pi) = \sum_{t=1}^{n} \beta^{t-1} R_t & (n \geq 1, \beta \in (0, \beta_0), \beta_0 > 0), \\ B_\infty(\pi) = \sum_{t=1}^{\infty} \beta^{t-1} R_t & (\beta \in (0,1)), \end{cases} \tag{5-2}$$

其中 β 为折扣因子.

对于给定的目标值 $x \in \mathbf{R} = (-\infty, +\infty)$, 以 $\tau(\pi, x)$ 表示在策略 π 下得到的折扣总报酬首次超过 x 的时间, 即

$$\tau(\pi, x) = \inf\{k : B_k(\pi) > x, k \geq 1\}. \tag{5-3}$$

规定 $\inf\varnothing = +\infty$.

5.1.2 概率(风险)最小准则

本章考虑的概率准则有以下二类(假定给定目标值 x 和阶段数 $n, n \geq 1$).

1. n 阶段(折扣总报酬)概率(准则)风险

寻找策略 π^* 使其满足

$$P(B_n(\pi^*) \leq x \mid X_1 = i) = \inf_\pi P(B_n(\pi) \leq x \mid X_1 = i) \qquad (\forall i \in S, x \in \mathbf{R}), \tag{5-4}$$

即使第 n 阶段折扣总报酬未超过目标值 x 的概率(风险)达最小. 该准则可称为 n 阶段风险准则.

2. 前 n 阶段上概率(风险)准则

寻找策略 π^*, 使其满足

$$P(\tau(\pi^*, x) > n \mid X_1 = i) = \inf_\pi P(\tau(\pi, x) > n \mid X_1 = i) \qquad (\forall i \in S, x \in \mathbf{R}), \tag{5-5}$$

即使折扣总报酬在前 n 阶段上(含 n 阶段, 下同)均未超过目标值 x 的概率(风险)达到最小. 该准则可简称为前 n 阶段上风险准则, 或称首达目标值最小风险准则.

5.1.3 原有模型框架存在的不足

对于上述概率准则的优化问题, 决策者在各阶段选取行动作决策时, 不仅要考虑当时系统本身所处的状态, 还要考虑决策者所给定的目标值. 即影响决策的因素

不仅仅是系统所处的状态.因此,在原有模型框架上定义的只依赖于系统状态的策略,在理论分析中存在难以克服的问题(如最优策略存在性问题),因而达不到优化的目的.

倘若把决策者的意愿与要求和系统状态融为一体,统一起来,即把决策者在作决策时需要考虑的所有因素统称为决策状态,那么,策略应是基于决策状态而选取行动的规则序列.这种新的策略能充分和及时反映决策者的意愿,也更贴近于序贯决策过程运行的实际情况.为此要研究由模型式(5-1)描述的可控系统与决策者目标值构成的大系统,这个大系统的状态就是决策状态.下面要建立反映这个大系统的模型框架,给出基于决策状态的策略的严格定义,以便解决对风险敏感的、类似由式(5-4)或式(5-5)给出的概率准则的优化问题.

5.2 基于决策状态的 MDP 模型

5.2.1 模型框架

定义1 称序对 $e=(i,x)$ 为大系统的**决策状态**.其中,$i\in S$ 是系统状态;$x\in\mathbf{R}$ 是目标值.称

$$E=\{e:e=(i,x),i\in S,x\in\mathbf{R}\}=S\mathbf{R}$$

为大系统的**决策状态空间**.

若第 t 阶段决策状态 $e_t=(i,x)$,则表明在 t 阶段系统状态 $i_t=i$,决策者的目标值为 x.如采用行动 $a_t=a\in A(i)$,则系统依概率 $q(j\mid i,a)$ 在 $t+1$ 阶段到系统状态 $i_{t+1}=j$,并按概率分布 $G(\cdot\mid i,a,j)$ 获得报酬 $R_t=r$.这样在 t 阶段已获报酬 r.考虑折扣因子 β,在 $t+1$ 阶段,决策者的目标值应为 $(x-r)\beta^{-1}$.这意味在 $t+1$ 阶段决策状态为 $e_{t+1}=(j,(x-r)\beta^{-1})$.于是引入基于决策状态 MDP 模型如下.

定义2 离散时间基于决策状态的 MDP 模型(在由模型式(5-1)描述的系统基础上)具有以下结构:

$$(E,A,P,\widehat{r}),\tag{5-6}$$

其中

(1)$E=S\mathbf{R}$ 为决策状态空间,S 为系统状态空间,$\mathbf{R}=(-\infty,+\infty)$ 为目标值全体.

(2)$A=\bigcup_{(i,x)\in E}A(i,x)$ 为行动集,$A(i,x)$ 为当决策状态在 $e=(i,x)$ 时的允许行动集.设 $A(i,x)\subset A(i),\forall(i,x)\in E$.

(3)P 为决策状态转移概率测度,满足

$$\begin{aligned}&P(C\times B\mid e_t=(i,x),a_t=a)\\&\quad=\sum_{j\in C}q(j\mid i,a)\int_{\mathbf{R}}I_B((x-r)\beta^{-1})G(\mathrm{d}r\mid i,a,j)\\&\qquad\qquad(C\subset S,B\in\mathscr{B}(\mathbf{R})),\end{aligned}\tag{5-7}$$

其中 I_B 为集合 B 的示性函数.

(4)$\widehat{r}$为报酬函数,满足

$$\widehat{r}((i,x),a,(j,y)) = \begin{cases} x-\beta y & (M_1 \leqslant x-\beta y \leqslant M_2,\\ & (i,x),(j,y) \in E, a \in A(i,x)),\\ 0 & (\text{其他}). \end{cases} \tag{5-8}$$

注意:由于 $E = S\mathbf{R}$ 已是非可数集,因此,在此基础上引出的许多概念的可测性问题要按 1.6 节博雷尔空间的 MDP 来类似定义与处理.

5.2.2　基于决策状态空间的策略

为使记号不过于繁多,本章约定 $i_n, x_n, a_n, e_n = (i_n, x_n), r_n$ 既分别表示第 n 阶段的系统状态、决策者目标值、采用的行动、决策状态及获得的报酬变量,也用它们表示相应变量的取值或实现.记

$$K = \{(e,a): e \in E, a \in A(e)\},$$

$$H_1 = E, H_n = K^{n-1}E = KH_{n-1}, \quad n > 1, \quad H_\infty = \lim_{n\to\infty} H_n.$$

称
$$h_n = (e_1, a_1, \cdots, e_{n-1}, a_{n-1}, e_n) \in H_n$$
为直到 n 阶段的一个历史,H_n 为直到 n 阶段的历史集.其中 $e_k \in E; a_k \in A(e_k); 1 \leqslant k \leqslant n-1; e_n \in E$.显然,$H_n(n>1)$ 是 $\widetilde{H}_n = (EA)^{n-1}E = EA\widetilde{H}_{n-1}$ 的可测子集.

定义3　称 $\pi = (\pi_t, t \geqslant 1)$ 为**基于决策状态空间的策略**,简称为**策略**.其中 $\pi_n(n \geqslant 1)$ 是从 H_n 到 A 的转移概率测度(随机核),并有

$$\pi_n(A(e_n) \mid h_n) = 1 \qquad (\forall h_n \in H_n, n \geqslant 1),$$

$$\Pi = \{\pi\}.$$

定义4　称 $\delta = (f_n, n \geqslant 1)$ 为一个确定性策略,其中 $f_n(n \geqslant 1)$ 是从 H_n 到 A 的可测映射(变换),满足 $f_n(h_n) \in A(e_n), \forall h_n \in H_n, n \geqslant 1$. $\Pi^d = \{\delta\}$.

定义5　若 f 是从 E 到 A 的可测映射,且 $f(e) \in A(e), e \in E$,则称 f 为决策函数. $F = \{f\}$.

定义6　称 $\pi = (\pi_t, t \geqslant 0) \in \Pi$ 为马氏策略,若 $\pi_n(\cdot \mid h_n) = \pi_n(\cdot \mid e_n), \forall h_n = (e_1, a_1, e_2, a_2, \cdots, e_{n-1}, a_{n-1}, e_n) \in H_n$.记 Π_m 为全体马氏策略.

定义7　称 $\pi \in \Pi_m$ 为平稳策略,$\pi_n(\cdot \mid h_n) = \pi_1(\cdot \mid e_n), \forall h_n \in H_n, n \geqslant 1$.此时记 $\pi = \pi_1^{\infty}$, Π_s 为全体平稳策略.

定义8　称 $\delta = (f_n, n \geqslant 1) \in \Pi^d$ 为确定性马氏策略,若 $f_n \in F$.记

$$\Pi_m^d = \{\delta: \delta = (f_n, n \geqslant 1), \forall f_n \in F, n \geqslant 1\}.$$

称 f^∞ 为确定性平稳策略,若 $f \in F$.记

$$\Pi_s^d = \{f^\infty: f \in F\}.$$

定义9　记 Π_0 为全体与目标值 $x_n(n \geqslant 1)$ 无关的策略集,即 Π_0 是基于系统状态及其历史进行决策的策略类(标准的期望准则优化模型的策略类).

定义10　设 $\pi = (\pi_t, t \geqslant 1) \in \Pi, (e,a) \in K$ 为给定的一阶段历史,称

$$^1\pi^{(e,a)} = (^1\pi_k^{(e,a)}, k \geqslant 1)$$

为对(e,a)的**截首策略**,其中${}^{1}\pi_k^{(e,a)}(\cdot\mid h_k)=\pi_{k+1}(\cdot\mid(e,a),h_k)$,对于$h_k\in H_k,k\geqslant 1$.称

$$\pi(n)=(\pi_1,\pi_2,\cdots,\pi_n)$$

为π关于前n阶段的**截断策略**.

设给定$\pi=(\pi_k,k\geqslant 1)\in\Pi)$及初始决策状态$e_1=e\in E$,根据测度论可知,由$\pi,P$及$e_1=e$可唯一确定$(\widetilde{H}_\infty,\mathscr{B}(\widetilde{H}_\infty))$上的一个概率测度$p_e^\pi$,满足$p_e^\pi(H_\infty)=1$,其中$\widetilde{H}=\lim\limits_{n\to\infty}\widetilde{H}_n$,$P_e^\pi(\cdot\mid e_1=e)=P_e^\pi(\cdot)$.

定义11 称随机过程$\{\widetilde{H}_\infty,\mathscr{B}(\widetilde{H}_\infty),p_e^\pi,\{(i_n,x_n,a_n),n\geqslant 1\}\}$为基于决策状态空间的马尔可夫决策过程.

5.2.3 基于决策空间的最小风险模型

为简化记号,以下当采用的策略π明确时,分别用B_n,B_∞和$\tau(x)$代替$B_n(\pi),B_a(\pi)$和$\tau(\pi,x)$.

定义12 对于给定的$n\geqslant 1$,若$\pi^*\in\Pi$,满足

$$P^{\pi^*}(B_n\leqslant x\mid e_1=(i,x))=\inf_{\pi\in\Pi}P^\pi(B_n\leqslant x\mid e_1=(i,x))\quad(\forall(i,x)\in E),\tag{5-9}$$

则称π^*是关于n阶段最小风险准则最优策略,简称为**n阶段最小风险策略**.

若策略$\pi^*\in\Pi$,满足

$$P^{\pi^*}(\tau(x)>n\mid e_1=(i,x))=\inf_{\pi\in\Pi}P^\pi(\tau(x)>n\mid e_1=(i,x))\quad(\forall(i,x)\in E),\tag{5-10}$$

则称π^*是关于前n阶段上最小风险最优策略,简称为前n阶段上最小风险策略.

以$P^\pi(B_n\leqslant x\mid e_1=e)$做为优化准则的模型,称为$n$阶段最小风险模型;以$P^\pi(\tau(x)>n\mid e_1=e)$做为优化准则的模型,称为前$n$阶段上最小风险模型.

注意:对于非负报酬情形,即当$G([0,+\infty)\mid i,a,j)=1,\forall i,j\in S,a\in A(i)$时,二者是等价的.

下面主要讨论n阶段最小风险模型.

5.3 n阶段最小风险模型

5.3.1 目标函数与最优值函数

定义13 设$\pi\in\Pi$,称

$$\begin{cases}F_n^\pi(i,x)=P^\pi(B_n\leqslant x\mid e_1=(i,x)) & ((i,x)\in E,n\geqslant 1),\\ F_\infty^\pi(i,x)=P^\pi(B_\infty\leqslant x\mid e_1=(i,x)) & ((i,x)\in E),\end{cases}\tag{5-11}$$

为策略π对应的目标函数;称

$$(E, A, P, \widehat{r}, F_n) \tag{5-12}$$

为 n 阶段最小风险模型;称

$$F_n^*(i,x) = \inf_{\pi \in \Pi} F_n^\pi(i,x) \qquad ((i,x) \in E, n \geqslant 1), \tag{5-13}$$

$$F_\infty^*(i,x) = \inf_{\pi \in \Pi} \{F_\infty^\pi(i,x)\} \qquad ((i,x) \in E).$$

分别为 n 阶段最优值函数与无限阶段最优值函数.记

$$b_n = \begin{cases} nM_1 & (\text{当 } \beta = 1 \text{ 时}), \\ (1-\beta^n)(1-\beta)^{-1}M_1 & (\text{当 } \beta \neq 1, \beta > 0 \text{ 时}), \end{cases}$$

$$d_n = \begin{cases} nM_2 & (\text{当 } \beta = 1 \text{ 时}), \\ (1-\beta^n)(1-\beta)^{-1}M_2 & (\text{当 } \beta \neq 1, \beta > 0 \text{ 时}), \end{cases}$$

$$D = \{u, u: E \to [0,1], \text{可测}\}.$$

定义14 对于任给的 $u \in D$,定义 **K 算子**如下:$\mathrm{K}: D \to D$,

$$\mathrm{K}u(i,x,a) = \sum_{j \in S} q(j \mid i,a) \int_{\mathbf{R}} u(j,(x-r)\beta^{-1}) G(\mathrm{d}r \mid i,a,j) \qquad ((i,x) \in E, a \in A(i,x)). \tag{5-14}$$

定义15 设 $\delta^\infty \in \Pi_s, u \in D$,定义变换(算子)$\mathrm{T}_\delta$ 和 T 为

$$\begin{cases} \mathrm{T}_\delta u(i,x) \\ \quad = \sum_{a \in A(i)} \delta(a \mid i,x) \sum_{j \in S} q(j \mid i,a) \int_{\mathbf{R}} u(j,(x-r)\beta^{-1}) G(\mathrm{d}r \mid i,a,j) \\ \qquad ((i,x) \in E, a \in A(i)), \qquad (5\text{-}15) \\ \mathrm{T}u(i,x) = \min_{a \in A(i,x)} \mathrm{K}u(i,x,a), \mathrm{T}_\delta^n u = \mathrm{T}_\delta(\mathrm{T}_\delta^{n-1} u), \\ \mathrm{T}^n u = \mathrm{T}(\mathrm{T}^{n-1} u). \end{cases}$$

约定 $B_0 = 0$, $F_0^\pi(i,x) = P^\pi(B_0 \leqslant x \mid e_1 = (i,x))$, $\forall (i,x) \in E$,则

$$\begin{cases} F_0^*(i,x) = F_0^\pi(i,x) = I_{[0,\infty)}(x) & (\forall (i,x) \in E), \\ F_n^\pi(i,x) = F_n^*(i,x) = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} & \begin{matrix} (\text{当 } x < b_n \text{ 时}), \\ (\text{当 } x \geqslant d_n \text{ 时}), \end{matrix} \\ F_\infty^\pi(i,x) = F_\infty^*(i,x) = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} & \begin{matrix} (\text{当 } x < (1-\beta)^{-1}M_1, 0 < \beta < 1 \text{ 时}), \\ (\text{当 } x \geqslant (1-\beta)^{-1}M_2, 0 < \beta < 1 \text{ 时}), \end{matrix} \end{cases}$$

其中 $I_A(\cdot)$ 表集合 A 的示性函数.

注意:对于任何策略 $\pi \in \Pi_0$, $F_n^\pi(i,x)$ 和 $F_\infty^\pi(i,x)$ 均是 x 的分布函数.但对于 $\pi \in \Pi$,这个结论不成立,这一点务请读者注意!

引理1 设 $\pi = (\pi_k, k \geqslant 1) \in \Pi$,则 $\forall n \geqslant 1, (i,x) \in E$,

$$F_n^\pi(i,x) = \sum_{a \in A(i,x)} \pi_1(a \mid i,x) \sum_{j \in S} q(j \mid i,a) \times \int_{\mathbf{R}} F_{n-1}^{\pi(i,x,a)}(j,(x-r)\beta^{-1}) G(\mathrm{d}r \mid i,a,j). \tag{5-16}$$

且 $F_r^\pi \in D$，并由 $\pi(n)=(\pi_1,\pi_2,\cdots,\pi_n)$ 确定.

若将式(5-15)右边简记为 $\mathrm{T}_{\pi_1}F_{n-1}^{1\pi}(i,x)$，则式(5-15)化为

$$F_n^\pi = \mathrm{T}_{\pi_1}F_{n-1}^{1\pi} \qquad (n \geqslant 1). \tag{5-17}$$

定理1　(1) $\{F_n^*, n\geqslant 0\}$ 满足最优方程

$$F_0^* = I_{[0,\infty)}, \quad F_n^* = \mathrm{T}F_{n-1}^* \qquad (n\geqslant 1). \tag{5-18}$$

(2) $\forall n\geqslant 0, i\in S, F_n^*(i,x)$ 是 x 的分布函数.

(3) $\forall n\geqslant 0$，存在策略 $\pi\in \Pi_m^d$，使 $F_n^\pi = F_n^*$.

(4) $\forall n\geqslant 0,\quad F_n^*(i,x)=\inf\limits_{\pi\in\Pi}\{F_n^\pi(i,x)\}=\inf\limits_{\pi\in\Pi_m^d}\{F^\pi(i,x)\} \quad (\forall (i,x)\in E)$.

5.3.2　最优策略的存在性及结构

由定理1的(3)可立即得以下重要定理.

定理2　$\forall n\geqslant 1$，必存在 $\pi^*(n)\in\Pi_m^d$ 关于 F_n 是最优的，即对于有限 n 阶段最小风险模型，必存在确定性马氏策略是最优的.

注意：若策略仅限制在 Π_0 中(即原模型框架的策略类)，就不能保证最优策略(关于最小风险)的存在性.这说明基于决策状态的策略类蕴含着良好的性质.

下面介绍最优策略的性质与结构.

定义16　假设

$$A_n^*(i,x)=\{a: a\in A(i,x) \text{ 且 } \mathrm{K}F_{n-1}^*(i,x,a)=F_n^*(i,x)\} \qquad ((i,x)\in E, n\geqslant 1), \tag{5-19}$$

称 $A_n^*(i,x)$ 为 n 阶段的最优行动集，其元素称为 n 阶段最优行动，

$$A_n^*(i)=\bigcap_{x\in R}A_n^*(i,x) \qquad (i\in S, n\geqslant 1). \tag{5-20}$$

由定理2可知，对于任意 $(i,x)\in E, n\geqslant 1$，

$$A_n^*(i,x)\neq\varnothing.$$

但 $A_n^*(i)$ 可能为空集.

定理3　设 $f_k\in F$，$1\leqslant k\leqslant n$，且 $f_k(i,x)\in A_k^*(i,x)$，$\forall (i,x)\in E$，$1\leqslant k\leqslant n$. 若 $\pi=(\pi_k,k\geqslant 1)\in\Pi$，满足

$$\pi_k = f_{n-k+1}(1\leqslant k\leqslant n),$$

即 $\pi(n)=(f_n,f_{n-1},\cdots,f_1)$，则 π 为 n 阶段最小风险最优策略.

注意：定理3为寻优提供了途径.

定理4　设 $\pi=(\pi_k,k\geqslant 1)\in\Pi$，固定的 $(i,x)\in E$，则

$$F_n^\pi(i,x)=F_n^*(i,x),$$

当且仅当 $\pi_1(A_n^*(i,x)\mid i,x)=1$，且 $\pi_1(a\mid i,x)q(j\mid i,a)>0$ 时，

$$F_{n-1}^{1\pi(i,x,a)}(j,(x-r)\beta^{-1}) = F_{n-1}^*(j,(x-r)\beta^{-1}) \qquad (\text{a.s.}, G(\cdot\mid i,a,j)).$$

定理4说明，策略 π 是有限阶段最小风险最优策略，当且仅当在每个阶段的可实现状态上按策略 π 采取的行动是最优行动，且在各阶段的相应截首策略也是最优

的.

定理5　策略 π 是 n 阶段最优的充分必要条件是,n 阶段按 π 采取的行动是最优的.

下面给出存在与目标值无关的最优策略的充分必要条件.

定理6　若存在策略 $\pi \in \Pi_0$ 使 $F_n^{\pi} = F_n^*$,则 $A_n^*(i) \neq \varnothing$,且

$$\pi_1(A_n^*(i) \mid i) = 1.(\forall i \in S).$$

定理7　若 $A_k^*(i) \neq \varnothing, \forall i \in s, 1 \leqslant k \leqslant n$,则存在策略 $\pi \in \Pi_0$,使 $F_n^{\pi} = F_n^*$.

5.3.3　寻优算法

本小节假定模型式(5-12)满足以下条件:

1° 系统状态空间 S 为有限集;

2° R_t 是取值有限的离散型随机变量,即存在有限集 $w = \{r_1, r_2, \cdots, r_m\} \subset \mathbf{R}, r_1 < r_2 < \cdots < r_m$,使

$$G(w \mid i,a,j) = 1 \qquad (\forall i,j \in S, a \in A(i)).$$

令 $\quad P_{ijr}^a = q(j \mid i,a) G(\{r\} \mid i,a,j) \qquad (i,j \in S, a \in A(i), r \in w).$

将式(5-17)写成分量形式:

$$F_0^*(i,x) = I_{[0,+\infty)}(x),$$

$$F_n^*(i,x) = \min_{a \in A(i,x)} \Big\{ \sum_{j \in S, r \in w} P_{ijr}^a F_{n-1}^*(j,(x-r)\beta^{-1}) \Big\} \qquad (i \in S, n \geqslant 1). \tag{5-21}$$

记

$$b_n(i,x,a) = \sum_{j \in S, r \in w} P_{ijr}^a F_{n-1}^*(j,(x-r)\beta^{-1}) \qquad (i \in S, a \in A(i,x), n \geqslant 1), \tag{5-22}$$

$$I_n(i,x) = \min_{a \in A(i,x)} \{b_n(i,x,a)\} \qquad (i \in S, x \in \mathbf{R}, n \geqslant 1), \tag{5-23}$$

则式(5-19)可写成

$$A_n^*(i,x) = \{a : a \in A(i,x), b_n(i,x,a) = I_n(i,x)\} \qquad (i \in S, x \in \mathbf{R}, n \geqslant 1). \tag{5-24}$$

由定理1～定理3及定义15可知,寻优算法有如下步骤:

步骤1　将 $x = r_k, 1 \leqslant k \leqslant m$ 代入式(5-22)～式(5-24),得

$$b_1(i,r_k,a), \quad I_1(i,r_k), \quad A_1^*(i,r_k), \quad i \in S, \quad a \in A(i,r_k), \quad 1 \leqslant k \leqslant m.$$

选取 $\quad g_1(i,r_k) \in A_1^*(i,r_k), \quad 1 \leqslant k \leqslant m-1, \quad g_1(i,r_m) \in A(i,r_m),$

由式(5-21)、式(5-24),有

$$F_{1(i,x)}^{\pi} = \begin{cases} 0 & (x < r_1), \\ I_1(i,r_k) & (r_k \leqslant x < r_{k+1}, 1 \leqslant k \leqslant m-1), \\ 1 & (x \geqslant r_m), \end{cases}$$

$$A_1^*(i,x) = \begin{cases} A(i,x) & (x < r_1 \text{ 或 } x \geqslant r_m), \\ A_1^*(i,r_k) & (r_k \leqslant x < r_{k+1}, 1 \leqslant k \leqslant m-1). \end{cases}$$

令

$$g_1(i,x)=\begin{cases}g_1(i,r_m) & (x<r_1\text{ 或 }x\geqslant r_m),\\ g_1(i,r_k) & (r_k\leqslant x<r_{k+1},1\leqslant k\leqslant m-1).\end{cases}$$

步骤 2 假设对于 $l\geqslant 1$，F_l^*，A_l^* 和 g_l 已得到. 设 $F_l^*(i,x)(\forall i\in S)$ 的所有跳跃点为 $x_1<x_2<\cdots<x_M$. 按升序排列 $\beta x_k+r_h,1\leqslant k\leqslant M,1\leqslant h\leqslant m$，并将它们记为 $u_1<u_2<\cdots<u_N(N\leqslant mM)$，则对于 $j\in S,r\in W$，有

$$F_l^*(j,(x-r)\beta^{-1})=\begin{cases}0 & (x<u_1),\\ F_l^*(j,(u_k-r)\beta^{-1}) & (u_k\leqslant x<u_{k+1},\ 1\leqslant k\leqslant N-1),\\ 1 & (x\geqslant u_N).\end{cases}\qquad(5\text{-}25)$$

将 $x=u_k(1\leqslant k\leqslant N)$ 代入式(5-22) ~ 式(5-24)，计算

$$b_{l+1}(i,u_k,a),\quad I_{l+1}(i,u_k),\quad A_{l+1}^*(i,u_k),\quad i\in S,\quad a\in A(i,u_k),$$

并选取 $g_{l+1}(i,u_k)\in A_{l+1}^*(i,u_k),\quad 1\leqslant k\leqslant N-1,\quad g_{l+1}(i,u_N)\in A(i,u_N)$，则由式(5-21)、式(5-25)及式(5-24)，得

$$F_{l+1}^*(i,x)=\begin{cases}0 & (x<u_1),\\ I_{l+1}(i,u_k) & (u_k\leqslant x<u_{k+1},1\leqslant k\leqslant N-1),\\ 1 & (x\geqslant u_N),\end{cases}$$

$$A_{l+1}^*(i,x)=\begin{cases}A(i,x) & (x<u_1\text{ 或 }x\geqslant u_N),\\ A_{l+1}^*(i,u_k) & (u_k\leqslant x<u_{k+1},1\leqslant k\leqslant N-1).\end{cases}$$

记

$$g_{l+1}(i,x)=\begin{cases}g_{l+1}(i,u_N) & (x<u_1\text{ 或 }x\geqslant u_N),\\ g_{l+1}(i,u_k) & (u_k\leqslant x<u_{k+1},1\leqslant k\leqslant N-1).\end{cases}$$

步骤 3 若 $l+1<n$，则以 $l+1$ 代替 l，转入步骤 2.

若 $l+1=n$，则迭代终止.

如此求得 n 阶段最优值函数 F_n^* 和 n 阶段最优策略 $\pi=(g_n,g_{n-1},\cdots,g_1)^\infty$，而 $A_1^*(i,x),A_2^*(i,x),\cdots,A_n^*(i,x)$ 为相应的最优行动集. 由它们可获得所有的 n 阶段最优策略.

由以上算法可得到的满足附加条件 S,W 均为有限集的模型式(5-12)的 $F_n^*(i,x),A_n^*(i,x)$，它们有以下特性：

(1) 对于任意 $i\in S,n\geqslant 1,F_n^*(i,x)$ 是 x 的单调不减的函数，且是只有有限个跳跃点的阶梯函数；

(2) 对于任意 $i\in S,n\geqslant 1,A_n^*(i,x)$ 是从 R 到 $A(i,x)$ 的只有有限个间断点的集值函数；

(3) 对于 $n\geqslant 1$，设 $\pi^*=\{\pi_k^*,k\geqslant 1\}$ 是 n 阶段最优确定性马氏策略，则 $\pi_k^*(1\leqslant k\leqslant n)$. 具有与 F_{n-k+1}^* 和 A_{n-k+1}^* 相类似的结构.

5.3.4 计算实例

例1 设 $S=\{1,2,3,4\}$，$A=A(i)=\{1,2,3\}$. 转移概率矩阵 $Q(a)=[q(j\mid i,$

$a)\}$ 及报酬函数 $\boldsymbol{r} = \{r(i,a), i \in S, a \in A\}$ 的数据为

$$Q(1) = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.2 & 0.2 & 0.5 \\ 0 & 0.6 & 0.1 & 0.3 \\ 0.5 & 0.1 & 0.3 & 0.1 \\ 0.2 & 0.4 & 0 & 0.4 \end{bmatrix}, \quad Q(2) = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.1 & 0.2 & 0 \\ 0.2 & 0.3 & 0.4 & 0.1 \\ 0 & 0.2 & 0.1 & 0.7 \\ 0.3 & 0.4 & 0.3 & 0 \end{bmatrix},$$

$$Q(3) = \begin{bmatrix} 0.3 & 0.0 & 0.6 & 0.1 \\ 0.5 & 0.1 & 0.3 & 0.1 \\ 0.3 & 0.4 & 0.2 & 0.1 \\ 0.1 & 0.2 & 0.4 & 0.3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{r} = \begin{bmatrix} 15 & 11 & -6 \\ -7 & 9 & 6 \\ 10 & -12 & 2 \\ -13 & -7 & -4 \end{bmatrix}.$$

折扣因子取 $\beta = 0.6$.

由 5.3.3 节寻优算法,可得

当 $n = 1$ 时,

$$A_1^*(1,x) = \begin{cases} \{1,2,3\} & (x < -6), \\ \{1,2\} & (-6 \leqslant x < 11), \\ \{1\} & (11 \leqslant x < 15), \\ \{1,2,3\} & (15 \leqslant x), \end{cases}$$

$$A_1^*(2,x) = \begin{cases} \{1,2,3\} & (x < -7), \\ \{2,3\} & (-7 \leqslant x < 6), \\ \{1,2,3\} & (6 \leqslant x < 9), \\ \{1,2,3\} & (9 \leqslant x). \end{cases}$$

$$A_1^*(3,x) = \begin{cases} \{1,2,3\} & (x < -12), \\ \{1,3\} & (-12 \leqslant x < 2), \\ \{1\} & (2 \leqslant x < 10), \\ \{1,2,3\} & (10 \leqslant x). \end{cases}$$

$$A_1^*(4,x) = \begin{cases} \{1,2,3\} & (x < -13), \\ \{2,3\} & (-13 \leqslant x < -7), \\ \{3\} & (-7 \leqslant x < 4), \\ \{1,2,3\} & (-4 \leqslant x). \end{cases}$$

$$F_1(1,x) = I_{[0,+\infty)}(x),$$
$$F_1(2,x) = I_{[0,+\infty)}(x-9),$$
$$F_1(3,x) = I_{[0,+\infty)}(x-10),$$
$$F_1(4,x) = I_{[0,+\infty)}(x+4).$$

当 $n = 2$ 时,

$$A_2^*(1,x) = \begin{cases} \{1,2,3\} & (x < -8.40), \\ \{1,2\} & (-8.40 \leqslant x < 12.60), \\ \{1\} & (12.60 \leqslant x < 20.00), \\ \{1,2,3\} & (20.00 \leqslant x), \end{cases}$$

$$A_2^*(2,x)=\begin{cases}\{1,2,3\} & (x<-9.40),\\ \{2,3\} & (-9.40\leqslant x<3.60),\\ \{2\} & (3.60\leqslant x<6.60),\\ \{2,3\} & (6.60\leqslant x<11.40),\\ \{2\} & (11.40\leqslant x<18.00),\\ \{1,2,3\} & (18.00\leqslant x),\end{cases}$$

$$A_2^*(3,x)=\begin{cases}\{1,2,3\} & (x<-14.40),\\ \{1,3\} & (-14.40\leqslant x<-0.40),\\ \{1\} & (-0.40\leqslant x<19.00),\\ \{1,2,3\} & (19.00\leqslant x),\end{cases}$$

$$A_2^*(4,x)=\begin{cases}\{1,2,3\} & (x<-15.40),\\ \{2,3\} & (-15.40\leqslant x<-6.40),\\ \{2\} & (-6.40\leqslant x<-1.60),\\ \{3\} & (-1.60\leqslant x<5.00),\\ \{1,2,3\} & (5.00\leqslant x).\end{cases}$$

…………

5.4 无限阶段最小风险模型

本节讨论以 F_∞ 为目标函数的优化问题.称

$$(E,A,P,\hat{r},F_\infty) \tag{5-26}$$

为**无限阶段最小风险模型**.对于给定的 $\pi\in\Pi$,F^π由式(5-11)给出.

5.4.1 F_∞^π 与 F_∞^* 的性质

引理2 设 $\pi=(\pi_k,k\geqslant 1)\in\Pi$,则

$$F_\infty^\pi=T_{\pi_1}F_\infty^{{}^1\pi}$$

即 $\forall(i,x)\in E$,

$$F_\infty^\pi(i,x)=\sum_{a\in A(i,x)}\pi_1(a\mid i,x)\sum_{j\in S}q(j\mid i,a)\cdot\int_{\mathbf{R}}F_\infty^{{}^1\pi}(j,(x-r)\beta^{-1})G(\mathrm{d}r\mid i,a,j).$$

取 $b\leqslant M_1,d\geqslant M_2,M_1,M_2$ 见模型式(5-1).令

$$b_n=b\beta^n(1-\beta)^{-1},\quad d_n=d\beta^n(1-\beta)^{-1},\qquad (n\geqslant 1).$$

对于 F_n^* 与 F_∞^* 的关系,有以下定理.

定理8 对于任给的$(i,x)\in E$,$F_n^*(i,x-b_n)$是 n 的非增序列,且

$$\lim_{n\to\infty}F_n^*(i,x-b_n)=F_\infty^*(i,x).$$

定理9 F_∞^* 满足最优方程

$$F_\infty^*=\mathrm{T}F_\infty^*.$$

定理10　$0 \leqslant F_n^*(i, x - b_n) - F_\infty^*(i, x) \leqslant F_n^*(i, x - b_n) - F_n^*(i, x - d_n)$.

定理11　对于给定的 $i \in S$, $F_\infty^*(i, x)$ 是 x 的分布函数.

定理12　存在决策函数 $f \in F$, 使 $T_f F_\infty^* = F_\infty^*$.

可利用定理 8、定理 10, 用 F_n^* 来估计 F_∞^*.

5.4.2　最优策略的性质

定义17　对于给定的 $(i, x) \in E$, 有

$A_\infty^*(i, x) = \{a : a \in A(i, x)$　且 $KF_\infty^*(i, x, a) = F_\infty^*(i, x)\}$,

$$A_\infty^*(i) = \bigcap_{x \in R} A_\infty^*(i, x),$$

其中算子 K 由式(5-18)给出, 称 $A_\infty^*(i, x)$ 为无限阶段最优行动集, 称其元素为无限阶段最优行动.

由 $A(i, x)$ 有限性及定理 8 可知,

$$A_\infty^*(i, x) \neq \varnothing \qquad (\forall (i, x) \in E).$$

定理13　设 $\pi = (\pi_k, k \geqslant 1) \in \Pi$, $\delta^\infty \in \Pi_s$, 则

1° $F_\infty^\pi = F_\infty^*$, 当且仅当 $\forall (i, x) \in E$,

$$\pi_1(A_\infty^*(i, x) \mid i, x) = 1,$$

且当 $\pi_1(a \mid i, x) q(j \mid i, a) > 0$ 时,

$$F_\infty^{{}^1\pi(i, x, a)}(j, (x - r)\beta^{-1}) = F_\infty^*(j, (x - r)\beta^{-1}) \qquad (\text{a.s.}, G(\cdot \mid i, a, j)).$$

2° 如 $F_\infty^\pi = F_\infty^*$, 且 $T_\delta F_\infty^\pi = F_\infty^*$, 则

$$F_\infty^{(\delta^n, \pi)} = F_\infty^* \qquad (\forall n \geqslant 1),$$

其中 $(\delta^n, \pi) = (\delta, \cdots, \delta, \pi_1, \pi_2, \cdots)$, 表示前 n 阶段用 δ 决策, 接着第 $n+1$ 阶段用 π_1, $\pi_2 \cdots$

注意: 对于无限阶段最小风险模型, 即使 δ^∞ 采用的均是最优行动, 策略 δ^∞ 也未必是最优的.

定理14　存在策略 $\pi \in \Pi_0$ 使 $F_\infty^\pi = F_\infty^*$ 的充分必要条件是: $\forall i \in S$,

$$A_\infty^*(i) \neq \varnothing.$$

定理15　若 $\forall i \in S$, $A_\infty^*(i) \neq \varnothing$, 则 $F_\infty^* = \inf_{\pi \in \Pi_0} F_\infty^\pi$.

注意: 定理 14、定理 15 给出了存在不依赖目标值的最优策略的充分必要条件, 该条件同时也是一个存在最优策略的充分条件.

5.5　首达目标值最小风险模型

由本章式(5-3)定义可知, $\tau(x)$ 表示折扣总报酬首次超过目标值 x 的时间. 即给定的 $x \in \mathbf{R}$,

$$\tau(x) = \inf\{k : B_k > x, k \geqslant 1\},$$

$$B_k = \sum_{t=1}^{k} \beta^{t-1} R_t \qquad (k \geqslant 1).$$

5.5.1　定义与记号

定义18　设策略 $\pi \in \Pi$,称

$$g_n^{\pi}(i,x) = P^{\pi}(\tau(x) > n \mid e_1 = (i,x)) \qquad ((i,x) \in E, n \geqslant 1) \quad (5\text{-}27)$$

为由 π 产生的目标函数.称模型

$$(E, A, P, \hat{r}, g_n) \quad (5\text{-}28)$$

为**首达目标值最小风险模型**,其中 g_n 由式(5-27)定义.称

$$g_n^*(i,x) = \inf_{\pi \in \Pi}\{g_n^{\pi}(i,x)\} \qquad ((i,x) \in E, n \geqslant 1)$$

为首达目标值最小风险模型的最优值函数.若策略 $\pi^* \in \Pi$,满足

$$g_n^{\pi^*}(i,x) = g_n^*(i,x) \qquad (\forall (i,x) \in E),$$

则称 π^* 为首达目标值最小风险最优策略,或称 π^* 为前 n 阶段上最小风险最优策略.

值得指出的是,这里的 π^* 是使前 n 阶段上的折扣报酬 $B_1, B_2, \cdots, B_n$ 均未超过目标值的概率达到最小的策略.这是许多决策者更为关心的优化问题.

对于任意 $\pi \in \Pi, n \geqslant 1, g_n$ 与 F_n 有如下关系:

$$g_n^{\pi} \leqslant F_n^{\pi}, \quad g_n^* \leqslant F_n^*, \quad (5\text{-}29)$$

且当 $G([0,\infty) \mid i,a,j) = 1, \forall i,j \in S, a \in A(i,x)$ 时,式(5-29)的等号成立,即当报酬是非负随机变量时,二个模型等价.

为研究模型式(5-28),引入以下定义.

定义19　1° $D = \{u : u$ 为从 E 到$[0,1]$上的可测变换$\}$.

2° 对于任给的 $u \in D, \pi = (\pi_1, \pi_2, \cdots) \in \Pi$,定义变换 $\mathrm{K}, \mathrm{T}_{\pi_1}, T$ 如下:

$$\mathrm{K}u(i,x,a) = \sum_{j \in S} q(j \mid i,a) \int_{\mathbf{R}} u(j,(x-r)\beta^{-1}) I_{[0,+\infty)}(x-r) G(\mathrm{d}r \mid i,a,j)$$
$$(i,x) \in E, a \in A(i,x), \quad (5\text{-}30)$$

$$\mathrm{T}_{\pi_1} u(i,x) = \sum_{a \in A(i,x)} \pi_1(a \mid i,x) \mathrm{K}u(i,x,a) \qquad ((i,x) \in E), \quad (5\text{-}31)$$

$$\mathrm{T}u(i,x) = \min_{a \in A(i,x)} \{\mathrm{K}u(i,x,a)\} \qquad ((i,x) \in E), \quad (5\text{-}32)$$

$$\mathrm{T}^n u = \mathrm{T}(\mathrm{T}^{n-1} u).$$

显然,当 $f^{\infty} \in \Pi_s^d$,

$$\mathrm{T}_f u(i,x) = \mathrm{K}u(i,x,f(i,x)),$$

约定

$$g_0^{\pi}(i,x) = g_0^*(i,x) = I_{[0,\infty)}(x) \quad (\forall (i,x) \in E, \pi \in \Pi).$$

注意,对于一般的 $\pi \in \Pi, g_n(i,x)$ 未必是 x 的分布函数,但若 $\pi \in \Pi_0$,则 $\forall i \in S, g_n^{\pi}(i,x)$ 均是 x 的分布函数.

5.5.2　最优策略的存在性及有关性质

定理16　任取 $\pi = (\pi_t, t \geqslant 1), n \geqslant 1$,有

$$g_n^\pi = T_{\pi_1} g_{n-1}^{{}^1\pi}, \tag{5-33}$$

且 $g_n^\pi \in D$,并由 $\pi(n)$ 确定.

定理17　$\{g_n^*, n \geqslant 0\}$ 满足最优方程

$$g_0^* = I_{[0,\infty)}, \quad g_n^* = \mathrm{T} g_{n-1}^*. \tag{5-34}$$

定理18　任给 $n \geqslant 0, i \in S, g_n^*(i,x)$ 是 x 的分布函数.

定理19　对于任意的 $n \geqslant 0$,存在策略 $\pi \in \Pi_m^d$,使

$$g_n^\pi = g_n^*.$$

定理20

$$g_n^* = \inf_{\pi \in \Pi} g_n^\pi = \inf_{\pi \in \Pi_m^d} g_n^\pi \qquad (n \geqslant 1).$$

定理 16 ~ 定理 20 说明,对于有限阶段首达目标值最小风险模型,必存在确定性马氏策略是最优的.

定义20　$\forall (i,x) \in E, n \geqslant 1$,有

$$A_n^*(i,x) = \{a : a \in A(i,x) \quad 且\ \mathrm{K} g_{n-1}^*(i,x,a) = g_n^*(i,x)\},$$

$$A_n^*(i) = \bigcap_{x \in \mathbf{R}} A_n^*(i,x).$$

称 $A_n^*(i,x)$ 为 n 阶段(关于首达目标值)的最优行动集,称其元素为 n 阶段最优行动.

定理21　设 f_k 是从 E 到 A 的可测变换,满足 $f_k(i,x) \in A_k^*(i,x), \forall (i,x) \in E$, $1 \leqslant k \leqslant n$.对于 $\pi = (\pi_k, k \geqslant 1) \in \Pi$,若 $\pi_k = f_{n-k+1}, 1 \leqslant k \leqslant n$,即 $\pi(n) = (f_n, f_{n-1}, \cdots, f_1)$,则 π 是 n 阶段首达目标值最优策略.

定理22　设 $\pi = (\pi_k, k \geqslant 1), \forall (i,x) \in E$,则

$$g_n^\pi(i,x) = g_n^*(i,x),$$

当且仅当

$$\pi_1(A_n^*(i,x) \mid i,x) = 1,$$

且当 $\pi_1(a \mid i,x) q(j \mid i,x) > 0$ 时,

$$g_{n-1}^{{}^1\pi(i,x,a)}(j,(x-r)\beta^{-1}) I_{[0,\infty)}(x-r) = g_{n-1}^*(j,(x-r)\beta^{-1}) I_{[0,\infty)}(x-r)$$
$$(\mathrm{a.s.}, G(\cdot \mid i,a,j)).$$

定理23　如存在策略 $\pi \in \Pi_0$,使 $g_n^\pi = g_n^*$,则

$$A_n^*(i) \neq \varnothing,$$

且

$$\pi_1(A_n^*(i) \mid i) = 1 \quad (\forall i \in S).$$

定理24　如果对于所有 $i \in S, 1 \leqslant k \leqslant n, A_k^*(i) \neq \varnothing$,则存在策略 $\pi \in \Pi_0$ 使

$$g_n^\pi = g_n^*.$$

5.5.3　算法

附加假定:S 与 W 均为有限集.此时,求 g_n^* 及其最优策略的算法与5.4.3小节的算法步骤相同.只需将式(5-21) ~ 式(5-24) 中记号改为

$$g_0^*(i,x) = I_{[0,\infty)}(x),$$

$$g_n^*(i,x) = \min_{a \in A(i,x)} \left\{ \sum_{j \in S, r \in W} P_{ijr}^a g_{n-1}^*(j,(x-r)\beta^{-1}) I_{[0,\infty)}(x-r) \right\}$$

$$((i,x) \in E, n \geqslant 1),$$

$$b_n(i,x,a) = \sum_{j \in S, r \in R} P_{ijr}^a g_{n-1}^*(j,(x-r)\beta^{-1}) I_{[0,\infty)}(x-r)$$

$$((i,x) \in E, a \in A(i,x), n \geqslant 1),$$

$$l_n(i,x) = \min_{a \in A(i,x)} \{b_n(i,x,a)\} \quad ((i,x) \in E, n \geqslant 1).$$

即可.

参 考 文 献

1 Howard R A. Dynamic programming and Markov processes. New York: Wiley, 1960.

2 Derman C. Finite state Markovian decision processes. New York: Academic Press, 1970.

3 Ross S M. Introduction to stochastic dynamic programming. New York: Academic Press, 1983.

4 White D J. Markov decision processes. Chichester: John Wiley, 1993.

5 White D J. Real applications of Markov decision processes. Interfaces, 1985, 15(6): 73 ~ 83

6 Hernandez-lerma O. Adaptive Markov control processes. New York: Springer-Verlag, 1989.

7 Puterman M L. Markov decision processes: discrete stothastic dynamic programming. New York: John Wiley, 1994.

8 Filar J, Vrieze K. Competitive Markov decision processes. New York: Springer-Verlag, 1997.

9 Sennott L I. Stochastic dynamic bogramming and the Controe of queucing systems. New York: John Wileg & Sons. Inc. 1999.

10 董泽清. 马尔可夫决策规划. 见: 现代工程数学手册编委会. 现代工程数学手册(第Ⅳ卷). 武汉: 华中工学院出版社, 1987. 1171 ~ 1236

11 侯振挺, 郭先平. 马尔可夫决策过程. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1997.

·随机数学卷·

第18篇

可靠性与生存分析

编　者　陈家鼎
审校者　郑忠国

目录

引　言

产品寿命的评定与预测是现代可靠性研究的主要对象.生物和人的寿命的评估与预测是生物学和医学的重要研究内容.在这两方面的研究中,数学方法特别是概率统计方法起着重要的作用.17世纪开始出现的寿命表(例如,格朗特(J.Graunt)在1662年发表的"死亡率"表)就是研究人口寿命预测的统计方法,它可以看成是这种研究的最早范例.第二次世界大战以后,以工程为背景的可靠性理论和以生物医学为背景的生存分析得到了迅速的发展,已形成许多共同的数学理论和方法,而且新的方法还在不断出现.这些理论和方法对工程实践、医疗实践及其他领域(如经济预测、环境保护等)有很大的实用价值.

从数学角度看,上述两个方面(工程方面和生物医学方面)的寿命研究方法都是对一个或多个非负随机变量(寿命的数学抽象物)进行统计分析,其共同的理论和方法已成为现代随机数学的一个重要的分支——可靠性与生存分析(简称生存分析).应该指出,同一数学理论在不同应用领域的表现形式有时不同:使用不同的术语和符号.

本篇从实用的角度介绍可靠性与生存分析的基本概念和基本方法.若要掌握有关的数学理论和更多的方法以及实际应用中要注意的事项,请查阅本篇末所附的参考文献.

1　可靠性与生存分析的基本概念

1.1　基本概念

1.1.1　可靠性和生存函数

本篇所说的"产品"二字应作广义的理解,它可以是零件、部件、整机或系统(工程上对产品有细致的划分,见文献[7]).

定义1　产品在规定的条件下和规定的时间内完成规定功能的概率叫做产品的**可靠度**.

若将这个定义里的"概率"二字改为抽象的"能力",则这个定义就变为产品的"**可靠性**"(reliability)的定义.应该指出,这里所说的"规定条件"包括环境条件,即所有内部与外部条件,如温度、湿度、辐射、磁场、电场、冲击、振动,或其组合等.

从定义可看出,产品可靠度与时间因素有关(当然,在有些问题里时间因素不重要,可以略去),因而与产品的寿命密切相关.

产品的寿命(lifetime)指产品使用的持续期,其度量单位有工作小时或年、公里、次数等.设 T 表示非负的随机变量(如产品的寿命,生物的寿命,更一般地,自然界、人类社会及技术过程中某种状态的持续时间),T 的分布函数是 $F(t)=P(T\leqslant t)$(寿命 T 不超过 t 的概率),寿命 T 超过指定时间 t 的概率 $P(T>t)$ 叫做产品的**可靠性函数**,记为 $R(t)$. 显然 $R(t)=1-F(t)$. 在生物医学领域,$P(T>t)$ 叫做生物的**生存函数**,常用 $S(t)$ 表示.若要产品在规定的时间区间 $[0,t_0]$ 内完成规定的功能,则 t_0 叫做**任务时间**. $R(t_0)$ 就是产品的可靠度.

1.1.2　几个重要的可靠性(生存性)指标

定义2　对于给定的 $\beta\in(0,1)$,满足 $R(t_\beta)=\beta$ 的 t_β 叫做可靠度为 β 的**可靠寿命**(更确切地说 $t_\beta \overset{\text{def}}{=\!=} \sup\{t: R(t)=\beta\}$).

重要的可靠性指标(或生存性指标)除可靠寿命 t_β 外还有:

平均寿命 μ　($\mu=ET$, T 的数学期望),

中位寿命 m　($m=T$ 的中位数),

寿命方差 σ^2　($\sigma^2=T$ 的方差),

危险率(失效率、故障率) $\lambda(t)$.

$$\lambda(t)=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}P(T\leqslant t+\Delta t\mid T>t)\qquad(\text{当极限存在时}),$$

其中 $P(T\leqslant t+\Delta t\mid T>t)$ 表示寿命 T 超过 t 的条件下 T 不超过 $t+\Delta t$ 的概率.当 T 的分布密度 $f(t)$ 存在且连续时,有下列计算公式:

$$\lambda(t)=\frac{f(t)}{1-F(t)}=\frac{f(t)}{S(t)}\qquad(t\geqslant 0),\tag{1-1}$$

$$S(t)=\exp\left(-\int_0^t\lambda(u)\mathrm{d}u\right),\tag{1-2}$$

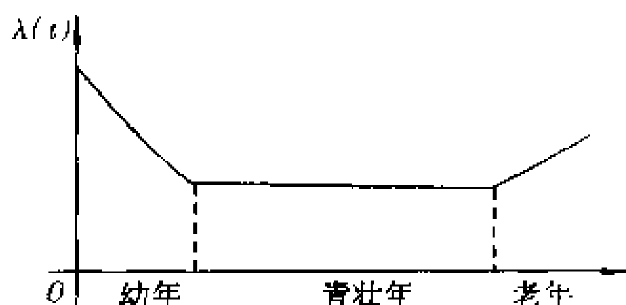


图 1-1

以上两式是生存函数(可靠性函数)与危险率之间的关系式.

以人的"寿命"为例,危险率 $\lambda(t)$ 的性态大致分成三个阶段:从出生到青年是第一阶段,从青年到进入老年是第二阶段,从进入老年到死亡是第三阶段.在第一阶段里,随着身体发育成长,抵抗疾病的能力逐步增长,函数 $\lambda(t)$ 是下降的;在第二阶段,身体发育基本完善了,是人一生中精力最充沛的时期,这时 $\lambda(t)$ 可看成常

数;到了老年,人的各种机能逐渐衰退,$\lambda(t)$是增函数.因此整个人生的危险率$\lambda(t)$的图形大致呈浴盆形,如图1-1所示.

1.2 数据的类型与寿命试验

可靠性与生存分析的基本问题之一是:如何根据数据来恰当地估计或推断生存函数或其他特性指标?

这需要对可靠性和生存分析领域中的有关数据类型有所了解.寿命数据有时是有意识安排试验得到的,有时则是通过现场调查得到的.数据一般含有**删失**(censoring)或不精密的特点.

删失分为右删失和左删失等两种.

定义3 若在进行观测或调查时,一个个体(或一件产品,下同)的确切寿命不知道,但只知道其寿命大于L,则称该个体的寿命在L上是**右删失**的,并称L是右删失数据;

若个体的确切寿命不知道,只知其寿命小于L,则称该个体的寿命在L上是左删失的,并称L是左删失数据.

常用L^+表示L是右删失数据,L^-表示L是左删失数据.右删失情况在实际工作中最为常见,左删失情况出现较少.

定义4 若个体的确切寿命不知道,只知其在$t^{(1)}$与$t^{(2)}$之间($t^{(1)}<t^{(2)}$),则称$[t^{(1)},t^{(2)}]$是该个体的**区间删失数据或区间型数据**.实际工作中凡是不能或不愿作连续监测时就会碰到这种数据.

除了删失型数据之外,还有一类数据,即所谓截断(truncation)型数据.其来源比较特殊.典型情况是,T和Z都是随机变量(Z可以是常量),当T的值不小于Z的值时,T的值可观测到;当T的值小于Z的值时,什么也观测不到.这种情况在工程上比较少见.工程上进行的截尾寿命试验里获得的数据都是删失型的.日常语言中的"截断数据"多是右删失数据.本篇不讨论"截断数据".

总之,对n个个体的寿命进行观测(或调查)得到的数据可概括为

(1)寿终数据(又叫完全寿命数据) $t_1,t_2,\cdots,t_{n_1}$;

(2)右删失数据 $u_1,u_2,\cdots,u_{n_2}$;

(3)左删失数据 $v_1,v_2,\cdots,v_{n_3}$;

(4)区间删失数据 $[t_1^{(1)},t_1^{(2)}],[t_2^{(1)},t_2^{(2)}],\cdots,[t_{n_4}^{(1)},t_{n_4}^{(2)}]$.

这里 $n_1+n_2+n_3+n_4=n,\quad 0\leqslant n_i\leqslant n,i=1,2,3,4.$

为了分析含有删失的数据,必须对产生删失现象的"删失机制"有所认识.对于大多数实际工作者来说,在他们的专业范围内所从事的寿命试验(或观测)中,何种"删失机制"在起作用是一清二楚的.在工程上(某些医学试验也一样)有许多数据是基于事先有意识安排好试验,试验过程受到严格控制获得的.工程上最常见的寿命试验有四种:定时截尾试验(又叫Ⅰ型截尾试验)、定数截尾试验(又叫Ⅱ型截尾试验)、混合型寿命试验和有替换的寿命试验.

1. 定时截尾试验

从一个总体(比如一大批产品)中随机抽出 n 个进行寿命试验，试验进行到预先给定的时间 T_0 为止. 这个方案叫 (n, T_0) 型方案. 此方案下的寿终数据是 $t_1, t_2, \cdots, t_\tau (0 \leqslant \tau \leqslant n)$，右删失数据有 $n-\tau$ 个：$t_{\tau+1}^+ = \cdots = t_n^+ = T_0$.

2. 定数截尾试验

从一个总体中随机抽取 n 个同时进行寿命试验，试验进行到恰好出现第 r 个寿终停止. 这个方案叫 (n, r) 型方案，r 是预先指定的整数 $(1 \leqslant r \leqslant n)$. 此方案下的寿终数据有 r 个：$t_1, t_2, \cdots, t_r (t_1 \leqslant \cdots \leqslant t_r)$，右删失数据有 $n-r$ 个：$t_{r+1}^+ = \cdots = t_n^+ = t_r$.

3. 混合型寿命试验

从一个总体中随机抽取 n 个同时进行寿命试验，试验进行到出现第 r 个寿终或试验时间达到 T_0 就停止. 这个方案叫做 (n, r, T_0) 型方案. 这里 T_0 和 r 都是事先指定的.

4. 有替换的寿命试验

随机抽取 n 个个体同时投入试验，一旦出现个体寿终，则立刻换上新的个体参加试验(在整个试验过程中，同时保持有 n 个个体在试验)，试验进行到"一定时刻"停止. 这个方案叫做有替换的方案. 这个"一定时刻"可以是一个固定常数，也可以是具有某种特性的"随机变量". 著名的军用标准 MIL-HDBK—781(1987)和我国军用标准 GJB—899—90 采用的都是有替换的试验方案.

1.3 协 变 量

可靠性和生存分析研究的另一基本问题是，个体的寿命是如何依赖于自身的或环境的条件的.

例如，在某种手术后病人的生存时间长短一般与病人的年龄以及病人作手术前的生理指标有关. 又如，玻璃电容器的使用寿命依赖于使用温度和电压. 这种对寿命起影响的变量，一般称为**协变量**(concomitant variable). 在技术产品的加速寿命试验中协变量被叫做加速变量或加速因子.

协变量可能不只一个，下面用 $\boldsymbol{X} = (x_1, x_2, \cdots, x_p)$ 表示协变量(向量). 可把寿命变量看成响应变量(输出变量)，把协变量看成是回归自变量(输入变量). 寻找 T 与 $\boldsymbol{X}$ 的关系式是一个回归分析问题. 可以设想有

$$T = \varphi(x_1, x_2, \cdots, x_p) + \varepsilon,$$

其中 ε 是随机项，其数学期望是 0. 回归分析的中心问题是找 φ 使 ε 的方差尽可能小. 这里的 φ 常有特定的形式，并含有未知的成分，需要从寿命 T 的数据(一般含有删失)出发加以确定.

1.4 研究方法

在对数据进行统计分析时，除了对"删失机制"必须有认识外，还应对寿命(生

存时间)T这个总体的已有知识进行收集和概括.

和普通统计学一样,可靠性与生存分析的方法主要也分为两大类:当对寿命总体知之甚少或毫无所知时,采用非参数方法;当总体的分布类型已知,只是其中若干个参数未知时,采用参数性方法.此外还有**半参数模型**(含有若干个未知参数又含有未知函数)及相应的**半参数方法**.一般说来,对于参数模型中未知参数的估计可以只需较小的样本,而对于非参数模型常要有较大的样本才能做出一定精度的统计推断.

在研究方法上总的指导思想是:

(1)如果被研究的总体能纳入参数模型又有成熟的参数性方法进行处理,则首选参数性方法;

(2)如果总体不能纳入参数模型,但可纳入半参数模型,而且又有比较成熟的半参数方法可供使用,则可选用半参数方法;

(3)如果总体很难纳入参数模型或半参数模型(或勉强可纳入,但无较成熟的方法进行统计分析),则采用非参数方法,这是最后不得已才采用的方法.

另外,近年来贝叶斯(T. Bayes)方法在可靠性与生存分析领域中的应用已得到统计学家的重视,已逐渐有较多的应用,特别是在工程、医学范围内,应用先验信息已成为非常重要的手段.虽然在确定先验信息时,常常引起统计学家的热烈争论,但也有一些已趋于共识.由于篇幅关系,这里将不涉及贝叶斯方法.有关贝叶斯方法的理论和应用,可参见本卷第8篇"贝叶斯统计",关于可靠性理论的贝叶斯方法的专著,目前尚属少见,读者可参阅文献[8].

2 常见的寿命分布

不同的具体问题中遇到的寿命分布一般是互不相同的.但大量实际情况表明,常见的寿命分布只有很少几个类型:指数分布、韦布尔(Weibull)分布、对数正态分布、Γ分布等.

2.1 指数分布

定义1 称随机变量T服从**指数分布**,如果它的分布函数

$$F(t)=\begin{cases}0 & (t\leqslant 0),\\ 1-\exp(-\lambda t) & (t>0),\end{cases} \tag{2-1}$$

其中$\lambda>0$,t为时间.指数分布的密度函数

$$f(t)=\begin{cases}0 & (t\leqslant 0),\\ \lambda\exp(-\lambda t) & (t>0).\end{cases}$$

指数分布的生存函数、数学期望、方差、中位数和危险率分别为

$$S(t)=\exp(-\lambda t),\qquad (t\geqslant 0),$$

$$\operatorname{var}(T)=\frac{1}{\lambda^2},\qquad ET=\frac{1}{\lambda},$$

$$\lambda(t)\equiv\lambda.\qquad m=\frac{1}{\lambda}\ln 2,$$

指数分布在可靠性研究中常常遇到,特别是电子器件的寿命,有很多可认为是服从指数分布的.从式(1-2)可知,指数分布乃是危险率恒等于常数的唯一分布.

2.2　韦布尔分布

定义 2　称随机变量 T 服从韦布尔分布,若它的分布函数

$$F(t)=\begin{cases}0 & (t\leqslant 0),\\ 1-\exp\left(-\left(\frac{t}{\eta}\right)^m\right) & (t>0),\end{cases}\tag{2-2}$$

其中 $m>0$ 叫做形状参数;$\eta>0$ 叫做刻度参数.这个分布也记作 $W(m,\eta)$,其密度函数为

$$f(t)=\begin{cases}0 & (t\leqslant 0),\\ \frac{m}{\eta}\left(\frac{t}{\eta}\right)^{m-1}\exp\left(-\left(\frac{t}{\eta}\right)^m\right) & (t>0).\end{cases}$$

更一般的韦布尔分布函数的定义为:

$$F(t)=\begin{cases}0 & (t\leqslant r),\\ 1-\exp\left(-\left(\frac{t-r}{\eta}\right)^m\right) & (t>r),\end{cases}$$

这是三参数韦布尔分布,当 $r=0$ 时上式就成为式(2-2).

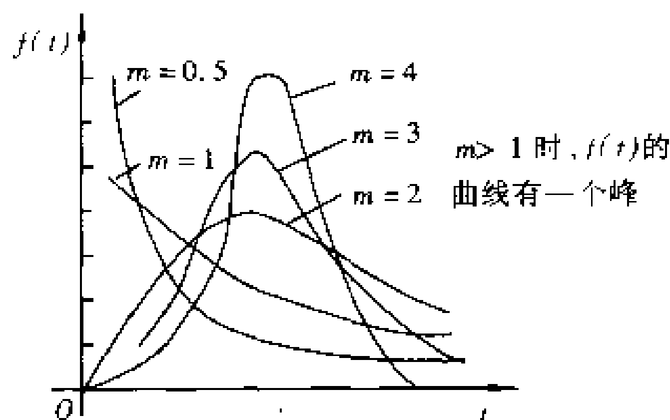


图 2-1

形状参数 m 是最重要的参数,它的值决定了密度函数曲线的形状,图 2-1 所示的是不同 m 值的密度函数曲线.

韦布尔分布的生存函数、数学期望、方差、中位数和危险率分别为

$$S(t)=\exp\left(-\left(\frac{t}{\eta}\right)^m\right)\qquad (t\geqslant 0),$$

$$ET = \eta\Gamma(1+\frac{1}{m}),$$

$$\mathrm{var}(T) = \eta^2(\Gamma(1+\frac{2}{m}) - (\Gamma(1+\frac{1}{m}))^2),$$

$$m = \eta(\ln 2)^{\frac{1}{m}},$$

$$\lambda(t) = \frac{m}{\eta}(\frac{t}{\eta})^{m-1} \qquad (t \geqslant 0).$$

后面恒用 ET 表示 T 的数学期望,$\mathrm{var}(T)$表示 T 的方差.$\Gamma(a)$表示 Γ 函数,即

$$\Gamma(a) = \int_0^\infty x^{a-1}\exp(-x)\mathrm{d}x \qquad (a > 0).$$

当 $m>1$ 时,$\lambda(t)$是 t 的增函数;当 $m<1$ 时,$\lambda(t)$是 t 的减函数;当 $m=1$ 时,$\lambda(t) \equiv \frac{1}{\eta}$,韦布尔分布化为指数分布.

与韦布尔分布密切有关的是极值分布.

定义 3 称随机变量 X 服从极值分布,若其分布函数为

$$F(x) = 1 - \exp(-\exp(\frac{x-\mu}{\sigma})) \qquad (\forall x), \tag{2-3}$$

其中 $\sigma>0$;μ 是任意实数.

定理 1 若 T 服从韦布尔分布 $W(m,\eta)$,$X=\ln T$,则 X 服从极值分布式(2-3),其中 $\mu=\ln\eta$;$\sigma=1/m$.

定理 2 若 X 服从极值分布式(2-3),则

$$EX = \mu - \gamma\sigma, \quad \mathrm{var}(X) = \frac{1}{6}\Pi^2\sigma^2,$$

其中

$$\gamma = \lim_n\left(\sum_1^n \frac{1}{K} - \ln n\right) = 0.577\,2\cdots$$

为欧拉常数.

2.3 对数正态分布

定义 4 称随机变量 T 服从对数正态分布,若 $X=\ln T$ 服从正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$.这时 T 的分布函数为

$$F(t) = \begin{cases} 0 & (t \leqslant 0), \\ \int_0^t \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma u}\exp(-\frac{1}{2\sigma^2}(\ln u - \mu)^2)\mathrm{d}u & (t > 0), \end{cases}$$

$$ET = \exp\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right),$$

$$\mathrm{var}(T) = (\exp(\sigma^2) - 1)\exp(2\mu + \sigma^2).$$

对数正态分布的危险率函数 $\lambda(t)$相当复杂.可以证明,存在 $t_0>0$ 使得 $\lambda(t)$在$(0,t_0)$上是增函数,在(t_0,∞)上是减函数,$\lim\limits_{t\to\infty}\lambda(t)=0$,而且

$$t_0 = \exp(\sigma x_0 + \mu),$$

其中 x_0 是方程

$$\frac{\exp(-\frac{x^2}{2})}{\int_x^\infty \exp(-\frac{u^2}{2})\mathrm{d}u} = \sigma + x$$

的唯一根.

2.4 其他分布

2.4.1 广义 Γ 分布

定义 5 称随机变量 T 服从广义 Γ 分布,如果它的分布密度

$$f(t) = \begin{cases} 0 & (t \leqslant 0), \\ \frac{b}{\Gamma(k)} a^{-bk} t^{bk-1} \exp\left(-(\frac{t}{a})^b\right) & (t > 0), \end{cases}$$

其中 $a>0, b>0, k>0$ 是三个参数.广义 Γ 分布的范围很广,当 $b=1$ 时便是通常的 Γ 分布;当 $k=1$ 时便是韦布尔分布;当 $k=b=1$ 时便是指数分布.

广义 Γ 分布的 n 阶矩的公式为

$$ET^n = \frac{a^n \Gamma(k + \frac{n}{b})}{\Gamma(k)} \qquad (n \geqslant 1).$$

2.4.2 帕雷托分布

定义 6 称随机变量 T 服从帕雷托(Pareto)分布,若它的分布函数

$$F(x) = \begin{cases} 0 & (x \leqslant x_0), \\ 1 - \left(\frac{x_0}{x}\right)^\alpha & (x > x_0). \end{cases}$$

其中 x_0, α 都是正数.可以证明帕雷托分布的 n 阶矩的公式为

$$ET^n = \frac{\alpha x_0}{\alpha - n} \qquad (\alpha > n).$$

2.4.3 对数逻辑斯谛分布

定义 7 称随机变量 T 服从对数逻辑斯谛(log logistic)分布,若 $X = \ln T$ 的分布函数(逻辑斯谛(logistic)分布)为

$$G(x) = \frac{1}{1+\exp(-\frac{x-\mu}{\sigma})},$$

其中 $\sigma > 0$;μ 是任意实数.当 X 的分布函数是上述 $G(x)$ 时,

$$EX = \mu, \quad \mathrm{var}(X) = \frac{\sigma^2 \pi^2}{3}.$$

逻辑斯谛分布最早来自生长曲线的研究,后来广泛应用于经济学和人口统计学.

3 指数分布情形下的参数估计与假设检验

3.1 概 述

设寿命 T 服从指数分布,其分布函数为

$$F(t,\theta)=1-\exp(-\frac{t}{\theta}) \qquad (t\geqslant 0), \tag{3-1}$$

其中 $\theta\in(0,\infty)$,θ 的直观意义是平均寿命,则可靠性函数

$$R(t)=\exp(-\frac{t}{\theta}) \qquad (t\geqslant 0),$$

可靠度为 R 的可靠寿命

$$t_R=-\theta\ln R.$$

由此可见,有关平均寿命、可靠度及可靠寿命的估计与检验问题都可直接转化为参数 θ 的估计与检验问题.实际工作(如可靠性鉴定和验收)中,遇到的检验问题是检验假设

$$H_0:\theta\geqslant\theta_0(\text{备择假设是 } H_1:\theta\leqslant\theta_1),$$

这里 $0<\theta_1<\theta_0$,θ_0 和 θ_1 是两个已知数,$d=\theta_0/\theta_1$ 叫做鉴别比.θ_1 是所谓的"可接受的最低质量水平"或"**最低可接受值**".

含不完全数据的类型很多,但主要有下列八种:

(1)无替换定数截尾试验数据;

(2)无替换定时截尾试验数据;

(3)无替换混合型截尾试验数据;

(4)无替换时间序贯截尾试验数据;

(5)有替换定数截尾试验数据;

(6)有替换定(总)时截尾试验数据;

(7)有替换混合型截尾试验数据;

(8)有替换时间序贯截尾试验数据.

下面分别讨论各种情形下的参数估计,对于几种重要情形,还给出假设检验方法.

3.2 无替换定数截尾情形

设有 n 个产品同时进行寿命试验,一旦出现 r 个寿终就停止试验.这种试验称为**无替换定数截尾**试验.这个 r 是预先指定的数,$1\leqslant r\leqslant n$.$r=n$ 时就是完全寿命试验.

设 n 个产品的寿命是 $x_1, x_2, \cdots, x_n$（它们相互独立同分布，共同分布是式(3-1)），获得的寿终数据是 $x_{(1)} \leqslant x_{(2)} \leqslant \cdots \leqslant x_{(r)}$（从小到大排列）. 各试验件的试验时间之和（以下简称总试验时间）

$$W = \sum_{i=1}^{r} x_{(i)} + (n - r) x_{(r)}.$$

θ 的点估计（最大似然估计）为

$$\hat{\theta} = \frac{W}{r}. \tag{3-2}$$

可以证明，$\frac{2W}{\theta}$ 服从 $2r$ 个自由度的 χ^2 分布. 于是 θ 的 $1-\alpha$ 水平置信下限和置信上限分别是

$$\begin{cases} \theta_{\mathrm{L}} = \dfrac{2W}{\chi_{1-\alpha}^2(2r)}, \\ \theta_{\mathrm{U}} = \dfrac{2W}{\chi_{\alpha}^2(2r)}, \end{cases} \tag{3-3}$$

其中 $\chi_\beta^2(m)$ 是 m 个自由度 χ^2 分布的（下侧）β 分位数，即

$$P_\theta(\theta \geqslant \theta_{\mathrm{L}}) = 1 - \alpha,$$

$$P_\theta(\theta \leqslant \theta_{\mathrm{U}}) = 1 - \alpha,$$

其中 $P_\theta(A)$ 乃是参数真值是 θ 时事件 A 的概率. 可以看出，$[\theta_{\mathrm{L}}, \theta_{\mathrm{U}}]$ 是 θ 的置信区间（置信水平为 $1-2\alpha$）.

若给定检验水平（即犯第一类错误的概率，或承制方风险）为 α，则当且仅当 W 的值不超过 $\frac{\theta_0 \chi_\alpha^2(2r)}{2}$ 时，拒绝假设 $H_0: \theta \geqslant \theta_0$.

3.3 无替换定时截尾情形

设 n 个产品同时进行寿命试验，进行到预定的时刻 t_0（$t_0 > 0$）就停止试验，称为**无替换定时截尾**试验. 设此试验方案下的全部寿终数据为 $x_{(1)} \leqslant x_{(2)} \leqslant \cdots \leqslant x_{(\tau)}$（从小到大排列，$\tau = 0$ 时则表示无寿终数据）. 此时，总试验时间（各试验件试验时间之和）为

$$W = \sum_{i=1}^{\tau} x_{(i)} + (n - \tau) t_0, \tag{3-4}$$

θ 的点估计（最大似然估计）为

$$\hat{\theta} = \frac{W}{\tau}. \tag{3-5}$$

当 $\tau = 0$ 时，规定 $\hat{\theta} = \infty$，其意义是：这时不能用任何实数作为 θ 的合理估计值.

当 $\tau = 0$ 时，θ 的 $1-\alpha$ 水平（单侧）置信下限 θ_{L} 和置信上限 θ_{U} 分别为

$$\theta_{\mathrm{L}} = \frac{nt_0}{-\ln\alpha}, \quad \theta_{\mathrm{U}} = \infty. \tag{3-6}$$

当 $\tau>0$ 时,θ 的置信限计算较复杂.陈家鼎和王宏提出了计算公式和方法①,下面简述如下.

令 $G(u,\theta)=P_\theta(\hat{\theta}\geqslant u)$,其中 $\hat{\theta}$ 由式(3-5)给出.可以证明,$u>0$ 时 $G(u,\theta)$ 是 θ 的严格增连续函数,且

$$\lim_{\theta\to 0}G(u,\theta)=0,\quad \lim_{\theta\to\infty}G(u,\theta)=1.$$

记 $\theta_{\mathrm{L}}(u)$ 是方程 $G(u,\theta)=\alpha$ 的唯一根,则 $\theta_{\mathrm{L}}(\hat{\theta})$ 就是 θ 的 $1-\alpha$ 水平置信下限.对于 $u\in(0,\infty)$,令

$$r=\frac{\theta}{t_0},\quad s=\frac{u}{t_0},$$

则

$$G(u,\theta)=\psi(n,s,r),$$

其中

$$\psi(n,s,r)=1-\sum_{k=1}^{n}\binom{n}{k}\exp\left(-\frac{n-k}{r}\right)I\left(k,\frac{1}{r},\frac{(s+1)k-n}{r}\right),$$

$$I(k,b,a)=\sum_{j=0}^{\lfloor a/b\rfloor}(-1)^j\binom{k-1}{j}(1-\exp(-b\wedge(a-bj)))\exp(-bj)+$$

$$\sum_{(i,j,l)\in E}(-1)^{j+l+1}\binom{i-1}{j}\binom{k-i+1}{l}\frac{(a-bj-bl)^{k-i}}{(k-i)!},$$

$$E=\{(i,j,l):1\leqslant i\leqslant k-1,\max\left(\left[\frac{a}{b}\right]+i-k,0\right)$$

$$\leqslant j<\min(a/b,i),0\leqslant l\leqslant\min(\lfloor a/b\rfloor-j,k-i+1)\},$$

$$u\wedge V=\min(u,V).$$

$\psi(n,s,r)$ 是 r 的严格增连续函数,记 $r_{\mathrm{L}}=r_{\mathrm{L}}(n,s)$ 为方程 $\psi(n,s,r)=\alpha$ 的唯一根,则 θ 的 $1-\alpha$ 水平置信下限为

$$\theta_{\mathrm{L}}(\hat{\theta})=t_0r_{\mathrm{L}}(n,\hat{\theta}/t_0).\tag{3-7}$$

北京大学概率统计系已编制了计算 $r_{\mathrm{L}}(n,s)$ 的软件,并列出了 $2\leqslant n\leqslant 15$ 时 $r_{\mathrm{L}}(n,s)$ 的数值表.

例1 设 $n=14$, $t_0=2.7$(时间单位为 100 h,运算中略去单位).共有 9 个寿终数据:0.2,0.5,1.8,0.9,1.3,0.8,2.4,1.3,0.6,其余 5 个未失效.由式(3-5)可知

$$\hat{\theta}=23.3/9=2.59,\text{又 }\hat{\theta}/t_0=0.96.$$

对于置信水平 $1-\alpha=0.90$,利用计算软件可得

$$r_{\mathrm{L}}=r_{\mathrm{L}}(14,0.96)\approx 0.643\ 4,$$

① Chen Jiading, Wang Hong. On the confidence limits for the parameter of exponential distribution in the life tests with fixed stopping time. Proceedings of The Second International Conference on Reliability, Maintainability and Safety, 1994.

故 θ 的置信下限

$$\theta_L = t_0 r_L(14, \hat{\theta}/t_0) = 1.74.$$

对于 θ 的置信上限，可进行类似的讨论，这里从略.

3.4　无替换混合型截尾情形

设 n 个产品同时投入寿命试验，试验进行到出现第 r 个寿终或试验时间达到 t_0 就停止试验. 这种试验称为**无替换混合型截尾**试验. 这里 r 和 t_0 是预先指定的数，$1 \leqslant r \leqslant n$，$t_0 > 0$. 用 W 表示各试验件试验时间的总和，τ 表示寿终数据个数，则 θ 的点估计（最大似然估计）为

$$\hat{\theta} = \frac{W}{\tau}. \tag{3-8}$$

$\tau = 0$ 时，规定 $\hat{\theta} = \infty$.

θ 的置信下限和置信上限的计算较复杂①，这里从略.

3.5　无替换时间序贯截尾情形

设有 n 个产品同时进行寿命试验，试验进行到按任何合理规则确定的时刻 ξ 就停止②. 这种试验称为**无替换时间序贯截尾**试验.

用 W 表示各试验件试验时间的总和，τ 表示寿终数据个数，则 θ 的点估计（最大似然估计）为

$$\hat{\theta} = \frac{W}{\tau}. \tag{3-9}$$

至于 θ 的置信限和进行假设检验的方法，参看有关文献③.

---

① 王宏. 混合截尾寿命试验情形下指数分布平均寿命的置信限. 应用概率统计，1996(4)：348

② 数学上的精确说法是：设 n 个产品的寿命分别是 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，在时刻 t，只能观测到

$$y_i(t) = \min(x_i, t) \text{和} \ \delta_i(t) \qquad (i = 1, 2, \cdots, n),$$

其中

$$\delta_i(t) = \begin{cases} 1 & (\text{当 } x_i \leqslant t \text{ 时}), \\ 0 & (\text{当 } x_i > t \text{ 时}). \end{cases}$$

令 $z(t) = (y_1(t), \delta_1(t), \cdots, y_n(t), \delta_n(t))$，用 $\mathscr{F}_t$ 表示使得所有 $z(s)(0 \leqslant s \leqslant t)$ 都可测的最小 σ 代数. 若非负随机变量 ξ 满足：对于一切 $t \geqslant 0$，事件 $\{\xi \leqslant t\}$ 属于 σ 代数 $\mathscr{F}_t$，则称 ξ 是合理的停止时刻，简称停时.

③ 陈家鼎，戴中维. 在时间序贯检验下指数分布均值的置信限. 数理统计与应用概率，1996(2)：89

3.6 有替换定数截尾情形

设有 n 个产品同时开始寿命试验，一旦出现失效(寿终)就换上新的继续试验.试验进行到出现第 r 个寿终就停止，这种试验称为**有替换定数截尾**试验. r 是预先指定的正整数.用 t_r 表示试验的停止时间，则总试验时间(各试验件的试验时间之和) $W=nt_r$. θ 的点估计(最大似然估计)为

$$\hat{\theta}=\frac{W}{r}=\frac{nt_r}{r}, \tag{3-10}$$

θ 的 $1-\alpha$ 水平置信下限和置信上限分别为

$$\theta_L=\frac{2W}{\chi^2_{1-\alpha}(2r)}, \tag{3-11a}$$

$$\theta_L=\frac{2W}{\chi^2_{\alpha}(2r)}. \tag{3-11b}$$

3.7 有替换定(总)时截尾情形

设有 n 个产品同时开始寿命试验，试验过程中一旦出现失效(寿终)就换上新的继续试验，试验进行到预定的时刻 T_0 就停止.这种试验称为**有替换定(总)时截尾**试验.此时，总试验时间 $W=nT_0$，失效(寿终)数为 τ，则 θ 的点估计和 $1-\alpha$ 水平置信下限 θ_L 及置信上限 θ_U 分别为

$$\hat{\theta}=\frac{W}{\tau}\qquad(\text{当 } \tau=0 \text{ 时规定 } \hat{\theta}=\infty), \tag{3-12}$$

$$\theta_L=\frac{2W}{\chi^2_{1-\alpha}(2\tau+2)}, \tag{3-13a}$$

$$\theta_U=\frac{2W}{\chi^2_{\alpha}(2\tau)}, \tag{3-13b}$$

当 $\tau=0$ 时，规定 $\theta_U=\infty$.

3.8 有替换定(总)时定数混合型截尾情形

这是指数分布时最常用的试验方案，工程上叫"定时截尾试验方案"(见我国军用标准 GJB899—90).这是针对检验问题

$$H_0:\theta\geqslant\theta_0\leftrightarrow H_1:\theta\leqslant\theta_1\qquad(\theta_0>\theta_1) \tag{3-14}$$

而制定的试验方案(H_0 是要检验的假设，H_1 是备择假设).

设有 n 件产品同时开始投入寿命试验，一旦出现失效(寿终)就换上新的继续试验，整个试验进行到时刻 T_0 或出现 r^* 个失效就停止试验.这种试验称为**有替换定(总)时定数混合型截尾**试验.这里 T_0 是事先确定的正数，r^* 是事先确定的正整数.用 ξ 表示试验的停止时刻，τ 表示停止时的累计失效数，则 $0\leqslant\tau\leqslant r^*$，总试验

时间 $W=n\zeta$. θ 的点估计(最大似然估计)和 $1-\alpha$ 水平置信下限、置信上限分别为

$$\hat{\theta}=\frac{W}{\tau}\quad(\tau=0\text{时规定}\hat{\theta}=\infty),\tag{3-15}$$

$$\theta_{\rm L}=\begin{cases}\dfrac{2W}{\chi^2_{1-\alpha}(2\tau+2)} & (\text{当}\ \tau<r^*\ \text{时}),\\ \dfrac{2W}{\chi^2_{1-\alpha}(2\tau)} & (\text{当}\ \tau=r^*\ \text{时}),\end{cases}\tag{3-16}$$

$$\theta_{\rm U}=\frac{2W}{\chi^2_{\alpha}(2\tau)}.\tag{3-17}$$

当 $\tau=0$ 时规定 $\theta_{\rm U}=\infty$.

注意:$\tau=0$(即无失效数据)时,θ 的 $1-\alpha$ 水平置信下限为 $\theta_{\rm L}=\dfrac{nT_0}{-\ln\alpha}$.

对上述检验问题的答案是:当累计失效数 $\tau<r^*$ 时,接受假设 H_0;当 $\tau=r^*$ 时,拒绝 H_0.

怎样确定时刻 T_0 和最大失效数 r^* 呢? 若规定承制方风险是 α(即犯第一类错误的概率不超过 α),使用方的风险是 β(即犯第二类错误的概率不超过 β),则应取

$$r^*\doteq\min\left\{r:\frac{\chi^2_{1-\beta}(2r)}{\chi^2_{\alpha}(2r)}\leqslant\frac{\theta_0}{\theta_1}\right\},$$

且

$$T_0=\frac{\theta_1}{2n}\chi^2_{1-\beta}(2r^*).$$

在这样确定的方案下承制方的风险和使用方的风险分别与 α,β 很接近. 对于 $\alpha=\beta=0.1,0.2,0.3$ 和 $\alpha=0.1,\beta=0.2$ 以及 $d=\theta_0/\theta_1=1.5,2.0,3.0$, GJB899—90 中给出了相应的具体方案(共有12个).

3.9 有替换时间序贯截尾情形

这是有替换试验的最一般情形. 设有 n 个产品同时投入寿命试验,试验过程中一旦出现产品失效(寿终)就换上新的继续试验,整个试验进行到按一定规则所规定的时间就停止试验. 这种试验称为**有替换时间序贯截尾**试验. 设停止时刻为 ζ,停止时的累计失效数为 τ,则总试验时间为 $W=n\zeta$, θ 的点估计(最大似然估计)为

$$\hat{\theta}=\frac{W}{\tau}.\tag{3-18}$$

当 $\tau=0$ 时,规定 $\hat{\theta}=\infty$.

注意:停止时刻 ζ 可以是随机变量,其严格的数学定义如下:

用 N_t 表示时间区间 $(0,t]$ 上累计的失效数 $(t\geqslant0)$, $\mathscr{F}_t$ 为使得所有 $N_s(0\leqslant s\leqslant t)$ 都可测的最小 σ 代数,称非负随机变量 ζ 是合理的停止时间,若对于一切 $t\geqslant0$,事件 $\{\zeta\leqslant t\}$ 属于 $\mathscr{F}_t$. 换句话说,停止时间 ζ 是否不超过 t,根据 $(N_s,0\leqslant s\leqslant t)$ 的取值就可以确定.

陈家鼎提出了计算 θ 的置信限的一般方法①，这里从略. 在我国军用标准GJB899—90中，针对检验问题式(3-14)提出了一类序贯截尾方案——所谓概率比序贯方案，其停止时刻 ζ 为

$$\zeta = \min\{t: t \geqslant 0, N_t \leqslant ct - s_0 \text{ 或 } N_t \geqslant ct + s_1\},$$

其中 $c>0$; $s_0>0$; $s_1>0$; N_t 是在时间区间 $(0,t]$ 上的累计失效数. 这个 ζ 的直观意义是：ζ 是使 $N_t \leqslant ct - s_0$ 或 $N_t \geqslant c_t + s_1$ 成立的最小 t. 当且仅当 $N_\zeta \leqslant c_\zeta - s_0$ 时接受假设 H_0.

对于这样的 ζ，GJB899—90的附录 A 中给出了八个具体方案，并给出了 θ 的置信下限 θ_L 和置信上限 θ_U 的数值表.

4 韦布尔分布情形下的参数估计

设寿命 T 服从韦布尔分布，其分布函数为

$$F(t)=\begin{cases}1-\exp\left(-\left(\frac{t}{\eta}\right)^m\right) & (t\geqslant 0),\\ 0 & (t<0),\end{cases} \tag{4-1}$$

其中 m,η 是待估的正数. 下面分定数截尾和定时截尾两种情形分别讨论参数估计问题.

4.1 定数截尾情形

设有 n 件产品同时投入寿命试验，试验进行到出现第 r 个寿终为止. 这里 r 是预先指定的整数，$1\leqslant r\leqslant n$. 设寿终数据是 $t_1,t_2,\cdots,t_r$(从小到大排列). 参数估计方法主要有两种.

4.1.1 最大似然估计

形状参数 m 的最大似然估计 $\hat{m}$ 乃是方程

$$\frac{1}{m}+\frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r}\ln t_i-\frac{\sum_{i=1}^{r}t_i^m\ln t_i+(n-r)t_r^m\ln t_r}{\sum_{i=1}^{r}t_i^m+(n-r)t_r^m}=0 \tag{4-2}$$

的唯一根(当 $r\geqslant 2,t_1,t_2,\cdots,t_r$ 不全相等时)，而刻度参数 η 的最大似然估计为

$$\hat{\eta}=\left(\frac{\sum_{i=1}^{r}t_i^{\hat{m}}+(n-r)t_r^{\hat{m}}}{r}\right)^{\frac{1}{\hat{m}}}, \tag{4-3}$$

① Chen Jiading. About the confidence limits for the exponential mean in any sequential case. The Sixth China-Japan Symposium on Statistics, 1997.

其中 $\widehat{m}$ 是 m 的最大似然估计.

注意:方程式(4-2)中等号左边是 m 的严格减连续函数,利用微机很容易求出方程的根.

可靠度 $R(t)$ 的最大似然估计为

$$\widehat{R}(t)=\exp\left(-\left(\frac{t}{\widehat{\eta}}\right)^{\widehat{m}}\right). \tag{4-4}$$

可靠度为 R 的可靠寿命 $t_R=\eta(-\ln R)^{1/m}$ 的最大似然估计为

$$\widehat{t}_R=\widehat{\eta}(-\ln R)^{1/\widehat{m}}. \tag{4-5}$$

式(4-4)和式(4-5)中的 $\widehat{m},\widehat{\eta}$ 分别是 m,η 的最大似然估计.

4.1.2 利用最好线性不变估计得到的估计

设 $X=\ln T$,从式(4-1)知 X 的分布函数为 $G((x-\mu)/\sigma)$,其中

$$G(z)=1-\exp(-\exp z), \tag{4-6}$$

$$\mu=\ln\eta,\quad \sigma=\frac{1}{m}. \tag{4-7}$$

设 $t_1,t_2,\cdots,t_r$ 是全部寿终数据(从小到大排列). 记 $x_i=\ln t_i,i=1,2,\cdots,r$,设 $l=s\mu+t\sigma$ 是参数的线性函数. 称 $\tilde{l}=\sum\limits_{1}^{r}k_ix_i$ 是 l 的**线性不变估计**,若均方误差 $E(\tilde{l}-l)^2$ 与 μ 无关,还称均方误差达到最小值的线性不变估计为**最好线性不变估计**.

可以证明,最好线性不变估计存在且唯一. 设 μ 的最好线性不变估计为 $\tilde{\mu}=\sum\limits_{i=1}^{r}\tilde{a}_i\ x_i$,$\sigma$ 的最好线性不变估计为 $\tilde{\sigma}=\sum\limits_{i=1}^{r}\tilde{c}_i\ x_i$. 这里 $\tilde{a}_i=\tilde{a}_{irn}$,与 r,n 都有关;$\tilde{c}_i=\tilde{c}_{irn}$,也与 r,n 都有关. 曼(N.R.Mann)等人给出了 $2\leqslant n\leqslant 25,2\leqslant r\leqslant n,1\leqslant i\leqslant r$ 时,$\tilde{a}_{irn}$ 和 $\tilde{c}_{irn}$ 的数值表①. 从(4-7)式知 m 和 η 分别有下列估计量:

$$\tilde{m}=\frac{1}{\tilde{\sigma}},\quad \tilde{\eta}=\exp(\tilde{\mu}). \tag{4-8}$$

由于 $R(t)=1-G((\ln t-\mu)\sigma^{-1})$,可靠寿命 $t_R=\exp(\mu+\sigma\ln\ln\frac{1}{R})$,故 $R(t)$ 和 t_R 分别有下列估计量:

$$\tilde{R}(t)=1-G\left(\frac{\ln t-\tilde{\mu}}{\tilde{\sigma}}\right), \tag{4-9}$$

---

① Mann N R, et al. Methods for statistical analysis of reliability and life data. New York: Wiley & Sons, 1974.

$$\tilde{t}_R = \exp(\tilde{\mu} + \tilde{\sigma}\ln\ln\frac{1}{R}). \tag{4-10}$$

令

$$W = \frac{\tilde{\sigma}}{\sigma}, \quad V_R = \frac{\tilde{\mu} - \ln t_R}{\tilde{\sigma}},$$

可以证明，W 的分布和 V_R 的分布都与 μ,σ 无关，而且上述曼等人的著作或文献[8]中已给出了 W 和 V_R 的分布的数值表. 对于给定的置信水平 $1-\alpha$（例如 $\alpha=0.10$），通过查表可找到 $\lambda_1<\lambda_2$，满足

$$P(\lambda_1 \leqslant W \leqslant \lambda_2) = 1-\alpha,$$

故 m 的置信区间为$\left[\frac{\lambda_1}{\tilde{\sigma}}, \frac{\lambda_2}{\tilde{\sigma}}\right]$. 通过查表可得到 $\varphi(R)$，满足

$$P\left(\frac{\tilde{\mu} - \ln t_R}{\tilde{\sigma}} \leqslant \varphi(R)\right) = 1-\alpha, \tag{4-11}$$

故 t_R 的置信下限为

$$\tilde{t}_R = \exp\{\tilde{\mu} - \varphi(R)\tilde{\sigma}\}.$$

可以证明，$\varphi(R)$是 R 的严格增连续函数，其反函数为 $\psi(\cdot)$. 从式(4-11)可知，

$$P(R \geqslant \psi)\left(\frac{\tilde{\mu} - \ln t_R}{\tilde{\sigma}}\right) = 1-\alpha.$$

令 $R=R(t)$，则 $R(t)$的 $1-\alpha$ 水平置信下限为

$$R_L(t) = \psi\left(\frac{\tilde{\mu} - \ln t}{\tilde{\sigma}}\right), \tag{4-12}$$

其中 ψ 是 φ 的反函数.

4.2　定时截尾情形

4.2.1　最大似然估计

设有 n 件产品投入寿命试验，试验进行到预定的时刻 T_0 停止. 所得的寿终数据是 $t_1 \leqslant t_2 \leqslant \cdots \leqslant t_\tau$（从小到大排列，也可能无寿终数据，则 $\tau=0$），当 $\tau>0$，且 $t_1<T_0$ 时形状参数 m 的最大似然估计$\hat{m}$乃是方程

$$\frac{1}{m} + \frac{1}{\tau}\sum_{i=1}^{\tau}\ln t_i - \frac{\sum_{i=1}^{\tau} t_i^m \ln t_i + (n-\tau)T_0^m \ln T_0}{\sum_{i=1}^{\tau} t_i^m + (n-\tau)T_0^m} = 0 \tag{4-13}$$

的唯一根. 此方程等号左边是 m 的严格降连续函数，其根利用计算机很容易求出.

刻度参数 η 的最大似然估计为

$$\hat{\eta} = \left(\frac{\sum_{i=1}^{\tau} t_i^{\hat{m}} + (n-\tau) T_0^{\hat{m}}}{\tau} \right)^{\frac{1}{\hat{m}}}. \tag{4-14}$$

可靠度 $R(t_0)$ 和可靠寿命 t_R 的最大似然估计分别为

$$\hat{R}(t_0) = \exp\left(- \left(\frac{t_0}{\hat{\eta}} \right)^{\hat{m}} \right), \tag{4-15}$$

$$\hat{t}_R = \hat{\eta}(-\ln R)^{1/\hat{m}}. \tag{4-16}$$

式(4-14)和式(4-15)中的 $\hat{m}$和 $\hat{\eta}$分别是 m,η 的最大似然估计.

上述公式与定数截尾情形下的公式是相似的.应该指出,当 $\tau=0$(即无寿终数据)时不可能给出各参数有意义的点估计,但可给出可靠度和可靠寿命的置信下限.

4.2.2 可靠度的置信下限

对于定时截尾试验下得到的数据,如何给出可靠度 $R(t_0)$的精确置信下限?这是韦布尔分布情形长久未解决的问题.1998年陈家鼎和房祥忠① 提出了一种解决的方法,简单介绍如下.

沿用4.2.1小节中的记号.当 $\tau>0$,且 $t_1<T_0$ 时,$\hat{R}(t_0)$由式(4-15)确定,当 $\tau=0$ 或 $t_1=T_0$ 时规定 $\hat{R}(t_0)=1$.令

$$G(u,\eta,m) = P_{\eta m}(\hat{R}(t_0) \geqslant u) \qquad (0<u\leqslant 1), \tag{4-17}$$

其中 $P_{\eta m}(A)$表示刻度参数和形状参数分别是 η 和 m 时事件 A 的概率.对于任给定的 $\alpha\in(0,1)$,令

$$R_L(u) = \inf\{R(t_0): \eta\in(0,\infty), m\in(0,\infty) \text{且 } G(u,\eta,m)>\alpha\}, \tag{4-18}$$

则 $R_L(\hat{R}(t_0))$就是可靠度 $R(t_0)$的置信下限(置信水平为 $1-\alpha$,理由见文献[1]).

为了计算 $R_L(u)$,作参数变换:

$$p = 1-\exp(-(\frac{T_0}{\eta})^m),$$

$$\theta = (\frac{t_0}{\eta})^m.$$

设 $U_1,U_2,\cdots,U_n$ 是相互独立同分布的随机变量,共同分布是(0,1)上的均匀分布.令

① Chen Jiading, Fang Xianzhong. On the exact lower confidence limits for the reliability in the case of weibull distribution. Proceedings of Joint statistical conference. Beijing, 1998, 1

$$\tilde{V}_i = \tilde{V}_i(p) = -\ln(1-\min(p, U_i));$$

$$\tilde{\Delta}_i = \tilde{\Delta}_i(p) = \begin{cases} 1 & (0 < U_i < p), \\ 0 & (\text{其他情形}). \end{cases} \qquad (i = 1, 2, \cdots, n),$$

记 $\tilde{m}$ 为方程

$$\frac{1}{m} + \frac{1}{\sum_{1}^{n} \tilde{\Delta}_i} \sum_{i=1}^{n} \tilde{\Delta}_i \ln \tilde{V}_i - \frac{\sum_{i=1}^{n} \tilde{V}_i^m \ln \tilde{V}_i}{\sum_{i=1}^{n} \tilde{V}_i^m} = 0 \qquad (m > 0)$$

的唯一根.令

$$\psi(\tilde{V}_1, \tilde{\Delta}_1, \tilde{V}_2, \tilde{\Delta}_2, \cdots, \tilde{V}_n, \tilde{\Delta}_n, u) = \left(\frac{(-\ln u) \sum_{i=1}^{n} \tilde{V}_i^{\tilde{m}}}{\sum_{i=1}^{n} \tilde{\Delta}_i} \right)^{1/\tilde{m}},$$

$H(p, \theta, u) = P(U_1, U_2, \cdots, U_n$ 不全相等且

$$\psi(\tilde{V}_1, \tilde{\Delta}_1, \tilde{V}_2, \tilde{\Delta}_2, \cdots, \tilde{V}_n, \tilde{\Delta}_n, u) \geqslant \theta) \qquad (0 < p < 1).$$

有下列结论:

1° $t_0 > T_0$ 时, $R_L(u) = 0$;

2° 当 $t_0 < T_0$ 时, $R_L(1) = \alpha^{\frac{1}{n}}$,

$$R(u) = \min(\exp(-\theta^*(u)), \alpha^{\frac{1}{n}}) \quad (0 < u < 1),$$

其中

$$\theta^*(u) = \sup\{\theta_p(u): 1 > p \geqslant 1 - \alpha^{\frac{1}{n}}\},$$

$$\theta_p(u) = \sup\{\theta: \theta \in (0, -\ln(1-p)) \text{且 } H(p, \theta, u) + (1-p)^n > \alpha\};$$

3° 当 $t_0 = T_0$ 时, $R_L(1) = \alpha^{\frac{1}{n}}$ 且

$$R_L(u) = \inf\{1 - p: 1 > p > 1 - \alpha^{\frac{1}{n}} \text{且 } H(p, -\ln(1-p), u) + (1-p)^n > \alpha\} \qquad (0 < u < 1).$$

北京大学概率统计系已编制了该方法的计算软件.

例 1 假设 $n = 10$, $T_0 = 1.5$(时间单位为 1 000h,下面的运算中省略),共有 6 个寿终数据:1.30,1.47,0.60,1.08,0.48,0.84,计算其可靠度的置信下限.

解 若 $\alpha = 0.20$, $t_0 = 1.0$,则可计算出可靠度 $R(t_0)$的置信下限为

$$R_L(\hat{R}(t_0)) = 0.545\ 180 (\text{置信水平为 } 0.80).$$

此例中的置信下限值很低,其原因在于对形状参数 m 的取值未作任何限制,可在$(0, \infty)$中任意取值,而样本量又很小.若试验前已知 m 在某个较小的范围内(比如 $m \in [1.1, 1.6]$),则计算出的置信下限值就会明显增大.

这个例子表明,在韦布尔分布的小样本情形下,必须尽量摸清形状参数所在的范围,否则计算出的可靠度的置信下限值太小而失去实用价值.

5 成功率(比率)的两样本检验

5.1 概 述

在工程上常要比较两种产品的可靠性是否有差别,在医药研究中常要比较两种医疗方法(或药品)的疗效是否相同,并确定哪一种好.以工业产品为例,设某产品的可靠度是 p_1,对这种产品在设计、材料或工艺上进行改变后制造出的新产品的可靠度是 p_2,p_1 和 p_2 都是未知的.今从原产品中抽取 n_1 件做试验,发现有 s_1 件成功(即能完成规定的任务);从新产品中抽取 n_2 件做试验,发现有 s_2 件成功.问:从数据(n_1,s_1)和(n_2,s_2)出发如何检验 $p_1\leqslant p_2$ 是否成立?这即是要回答下列检验问题:

$$H_0:p_1\leqslant p_2 \leftrightarrow H_1:p_1>p_2, \tag{5-1}$$

其中 H_0 是待检验的假设;H_1 是备择假设.回答这个问题的检验法主要有三个:正态理论方法、列联表方法、费希尔(R. A. Fisher)精确检验法.前两个方法计算简单,但使用条件苛刻,在样本量小,而 p_1 和 p_2 又靠近1或0时一般不能采用.第三种方法在任何情形下都可以用,但计算较复杂.下面分别介绍.

5.2 正态理论方法

设数据是(n_1,s_1),(n_2,s_2):令

$$\hat{p}_1=\frac{s_1}{n_1},\quad \hat{p}_2=\frac{s_2}{n_2},\quad \hat{p}=\frac{s_1+s_2}{n_1+n_2}, \tag{5-2}$$

则当 $n_1\hat{p}(1-\hat{p})\geqslant 5$ 且 $n_2\hat{p}(1-\hat{p})\geqslant 5$ 时,可用正态理论方法检验.

先计算统计量

$$z=\frac{\hat{p}_1-\hat{p}_2}{\sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)}}. \tag{5-3}$$

若检验水平为 α(常取 $\alpha=0.05$),用 $u_{1-\alpha}$表示$N(0,1)$的 $1-\alpha$ 分位数,则检验法是:

当 $z>u_{1-\alpha}$时,拒绝 $H_0:p_1\leqslant p_2$;当 $z\leqslant u_{1-\alpha}$时不拒绝 H_0.

注意:$\alpha=0.05$ 时,$u_{0.95}=1.65$.

例1 设 $n_1=20,s_1=15,n_2=30,s_2=9$,试进行可靠度检验.

解 根据式(5-2),得 $\hat{p}_1=0.75,\hat{p}_2=0.3,\hat{p}=0.48$,因此,$n_1\hat{p}(1-\hat{p})=5$,$n_2\hat{p}(1-\hat{p})=7.49>5$,故可用正态理论方法.按式(5-3)计算统计量,得

$$z=3.18>1.65,$$

故应拒绝 $H_0: p_1 \leqslant p_2$(检验水平为 0.05).

5.3 列联表方法

将数据 (n_1, s_1), (n_2, s_2) 列成表

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

其中 $a = s_1, b = n_1 - s_1, c = s_2, d = n_2 - s_2$.

计算各单元的"期望数" $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}$:

$$\begin{aligned} \bar{a} &= n_1 \frac{s_1 + s_2}{n_1 + n_2}, \quad \bar{b} = n_1 \frac{n_1 + n_2 - (s_1 + s_2)}{n_1 + n_2}, \\ \bar{c} &= n_2 \frac{s_1 + s_2}{n_1 + n_2}, \quad \bar{d} = n_2 \frac{n_1 + n_2 - (s_1 + s_2)}{n_1 + n_2}, \end{aligned} \tag{5-4}$$

当 $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}$ 均不小于 5 时,可用本**列联表方法**.

计算统计量

$$\chi^2 = \frac{(n_1 + n_2)\left(|ad - bc| - \frac{n_1 + n_2}{2}\right)^2}{(a + b)(c + d)(a + c)(b + d)}. \tag{5-5}$$

若检验水平为 α,用 $\chi^2_{1-\alpha}(1)$ 表示 1 个自由度的 χ^2 分布的(下侧)$1 - \alpha$ 分位数,则检验法是:

当 $\chi^2 > \chi^2_{1-\alpha}(1)$ 时拒绝 $H_0: p_1 \leqslant p_2$;当 $\chi^2 \leqslant \chi^2_{1-\alpha}(1)$ 时不拒绝 H_0.

例 2 数据同例 1,试进行可靠度检验.

解 根据式(5-4)进行计算,得:$\bar{a} = 9.6, \bar{b} = 10.4, \bar{c} = 14.4, \bar{d} = 15.6$,这些数都不小于 5,故可用列联表方法进行检验.按式(5-5)计算统计量,得

$$\chi^2 = 8.02 > \chi^2_{0.95}(1) = 3.84,$$

故应拒绝 $H_0: p_1 \leqslant p_2$(检验水平是 0.05).

5.4 费希尔精确检验法

设数据已列成表

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

其中 $$a_1 = s_1, \quad b = n_1 - s_1, \quad c = s_2, \quad d = n_2 - s_2.$$

当 $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}$(见(5-4)式)中至少有一个小于 5 时应用**费希尔精确检验法**.当然,其他情形也可以用这个检验.具体方法如下.

记 $m_1 = a + c, m_2 = b + d, N = n_1 + n_2$,设观测变量为

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix},$$

对于给定的 n_1, n_2, m_1, m_2,则满足条件

$$\begin{cases} x_{11} + x_{12} = n_1, x_{21} + x_{22} = n_2, \\ x_{11} + x_{21} = m_1, x_{12} + x_{22} = m_2 \end{cases} \tag{5-6}$$

的所有可能结果如下：

$$\begin{pmatrix} i & n_1 - i \\ m_1 - i & n_2 - m_1 + i \end{pmatrix} \qquad (i = l_1, l_1 + 1, \cdots, l_2),$$

其中　$l_1 = \max(m_1 - n_2, 0), \quad l_2 = \min(n_1, m_1).$

称左上角为 i 的表为第 i 表.显然,若第 i 表是

$$\begin{pmatrix} i & j \\ k & l \end{pmatrix},$$

则第 $i+1$ 表是

$$\begin{pmatrix} i+1 & j-1 \\ k-1 & l+1 \end{pmatrix}.$$

若记 $p(i)$ 为条件(5-6)下 $x_{11} = i$ 的条件概率,则

$$p(i) = \frac{n_1! n_2! m_1! m_2!}{N! i! (n_1 - i)! (m_1 - i)! (m_2 - n_1 + i)!}, \tag{5-7}$$

$$p(i+1) = p(i) \frac{jk}{(i+1)(l+1)}. \tag{5-8}$$

易知　$p(i) = \lambda_i p(l_1) \qquad (l_1 \leqslant i \leqslant l_2),$

$$\lambda_{l_1} = 1, \sum_{i=l_1}^{l_2} p(i) = 1.$$

于是

$$p(i) = \frac{\lambda_i}{\sum_{i=l_1}^{l_2} \lambda_i} \qquad (l_1 \leqslant i \leqslant l_2), \tag{5-9}$$

有时用式(5-9)计算 $p(i)$.对于给定的数据

$$\begin{pmatrix} s_1 & n_1 - s_1 \\ s_2 & n_2 - s_2 \end{pmatrix},$$

计算下列概率

$$p = \sum_{i=s_1}^{l_2} p(i) \qquad (l_2 = \min(n_1, m_1), m_1 = s_1 + s_2).$$

给定检验水平 α,当 $p \leqslant \alpha$ 时,拒绝 $H_0: p_1 \leqslant p_2$;当 $p > \alpha$ 时不拒绝 H_0.

例 3　假设 $n_1 = 25, s_1 = 23, n_2 = 35, s_2 = 30$,试进行可靠度检验.

解　根据式(5-2),有

$$\hat{p}_1 = s_1/n_1 = 0.920, \quad \hat{p}_2 = s_2/n_2 = 0.857,$$

数据表为

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 23 & 2 \\ 30 & 5 \end{pmatrix}.$$

从式(5-4)可知,b 单元的"期望数"$\bar{b} = 2.92 < 5$,故应用费希尔精确检验来回答检验问题式(5-1).因

$$n_1 = 25, \quad m_1 = s_1 + s_2 = 23 + 30 = 53.$$

故

$$l_2 = \min(n_1, m_1) = \min(25, 53) = 25.$$

计算

$$p = \sum_{i=23}^{25} p(i).$$

由式(5-7)可知,

$$p(23) = 0.252,$$

由式(5-8)可知,

$$p(24) = 0.105, \quad p(25) = 0.017,$$

于是 $p = 0.374 > 0.05$.故不应拒绝 $H_0: p_1 \leqslant p_2$(检验水平为 0.05).

6 常用的非参数方法

6.1 寿命表方法

为了估计完全未知的生存函数 $S(t)$,针对不同类型的数据有不同的方法.下面介绍历史悠久现在仍在使用的寿命表(life table)方法.

假设对一些个体(共 n 个)的寿命进行了观测,用下列方式对观测结果进行了登记和归纳:

把区间 $(0,\infty)$ 分成 $k+1$ 个小区间,$I_j = (a_{j-1}, a_j]$,$j = 1,2,\cdots,k+1$,这里 $a_0 = 0 < a_1 < a_2 < \cdots < a_k < a_{k+1} = \infty$.每个个体的寿命的确切值(或删失值)均不知道,只知其在哪个区间中寿终或右删失.对于 $j = 1,2,\cdots,k+1$,令

$N_j = n$ 个个体中在时刻 a_{j-1} 仍"活着",且未在 a_{j-1} 之前右删失的个体的个数,

$D_j = n$ 个个体中在 I_j 中寿终的个体数,

$W_j = n$ 个个体中在 $[a_{j-1}, a_j)$ 中右删失的个体数.

显然

$$N_1 = n, \quad N_j = N_{j-1} - D_{j-1} - W_{j-1} \qquad (j = 2,3,\cdots,k+1).$$

记

$$P_j = S(a_j), \quad p_j = P_j/P_{j-1}, q_j = 1 - p_j \qquad (j = 1,2,\cdots,k+1, P_0 = 1).$$

于是

$$P_j = p_1 p_2 \cdots p_j \qquad (j = 1,2,\cdots,k+1).$$

首先用下列公式估计 q_j:

$$\widehat{q}_j = \frac{D_j}{N_j - \frac{1}{2}W_j}. \tag{6-1}$$

再用 $\widehat{p}_j = 1 - \widehat{q}_j$ 估计 p_j;然后用公式

$$\widehat{P}_j = \widehat{p}_1\widehat{p}_2\cdots\widehat{p}_j \qquad (j = 1,2,\cdots,k+1) \tag{6-2}$$

估计 P_j;最后,对于任何 $t > 0$,选 j 满足 $a_j \leqslant t < a_{j+1}$,用

$$\widehat{S}(t) = \widehat{p}_j$$

作为 $S(t)$ 的估计.上述估计 $S(t)$ 的方法叫做**寿命表方法**.为了得到估计值 $\widehat{P}_j$,常采用列表方式概括原始数据和计算过程,这就是"寿命表"一词的来源.列表的栏目如下:

区间	死亡数	删失数	历险数	N'_j	$\widehat{q}_j$	$\widehat{p}_j$	$\widehat{P}_j$
I_j	D_j	W_j	N_j	$N_j - \frac{1}{2}W_j$	$\frac{D_j}{N'_j}$	$1-\widehat{q}_j$	$\widehat{p}_1\cdots\widehat{p}_j$

在计算 $\widehat{P}_j$ 时,可用递推公式 $\widehat{P}_j = \widehat{P}_{j-1}\widehat{p}_j$.

上述寿命表方法的关键是采用估计式(6-1).采用这个估计式的理由是基于一种想象:在区间$[a_{j-1}, a_j)$ 中所有右删失个体的删失值的平均值恰好是这个区间的中点.这种想象虽是一种假定,但在许多情形下是符合或近似符合实际的,因而上述寿命表方法得到广泛的应用.用估计式(6-1)得到的寿命表也叫**标准寿命表**.对于"删失机制",可以有多种不同的假定,因而会有别的估计式可代替式(6-1),于是有多种寿命表.例如表 6-1 所示的是某医学院对手术后的病人的寿命分析得到的(标准)寿命表.

表 6-1

区间 I_j	死亡数 D_j	删失数 W_j	历险数 N_j	N'_j	$\widehat{q}_j$	$\widehat{p}_j$	$\widehat{P}_j$
(0,1]	90	0	374	374	0.241	0.759	0.759
(1,2]	76	0	284	284	0.268	0.732	0.556
(2,3]	51	0	208	208	0.245	0.755	0.420
(3,4]	25	12	157	151	0.164	0.836	0.350
(4,5]	20	5	120	117.5	0.170	0.830	0.291
(5,6]	7	9	95	90.5	0.077	0.923	0.268
(6,7]	4	9	79	74.5	0.054	0.946	0.254
(7,8]	1	3	66	64.5	0.016	0.984	0.250
(8,9]	3	5	62	59.5	0.050	0.950	0.237
(9,10]	2	5	54	51.5	0.039	0.961	0.228
(10,∞)	47	0	47	47	1.000	0.000	0

6.2 乘积限估计

本方法要求全部寿终数据和右删失数据都是确切知道的,即不能有区间删失数据.

假定对总体 T 的 n 个个体的寿命进行观测,得到 $t_1, t_2, \cdots, t_n$,其中可含有右删失数据,但无左删失数据,将它们从小到大排列,得

$$t_{(1)} \leqslant t_{(2)} \leqslant \cdots \leqslant t_{(n)}.$$

若一个删失数据和一个寿终数据相等,则将寿终数据排在删失数据前,当 $t_{(i)}$ 是寿终数据时,令 $\delta_{(i)} = 1$;当 $t_{(i)}$ 是右删失数据时,令 $\delta_{(i)} = 0, 1 \leqslant i \leqslant n$.

定义 1 在上述假定的条件下,生存函数 $S(t)$ 的乘积限(product limit)估计为

$$\widehat{S}(t) = \begin{cases} 1 & (当\ t \in [0, t_{(1)})\ 时), \\ \prod\limits_{i=1}^{j}\left(\dfrac{n-i}{n-i+1}\right)^{\delta_{(i)}} & (当\ t \in [t_{(j)}, t_{(j+1)})\ 时), (j = 1, 2, \cdots, n-1), \\ 0 & (当\ t \geqslant t_{(n)}\ 时). \end{cases} \tag{6-3}$$

注意:当 $t_{(n)}$ 是右删失值时,有人不给出 $\widehat{S}(t_{(n)})$ 的定义,认为不能给出合理的估计值!

乘积限估计又叫 **PL 估计**,是卡普兰(Kaplan)和梅尔(Meier)于 1958 年首先提出的,也叫 K-M 估计.

由于 $ET = \int_0^{\infty} S(t)\mathrm{d}t$,故平均寿命可用 $\int_0^{\infty} \widehat{S}(t)\mathrm{d}t$ 来估计,从而 ET 有估计式

$$\widehat{ET} = t_{(1)} + \sum_{j=1}^{n-1} \widehat{S}(t_{(j)})(t_{(j+1)} - t_{(j)}). \tag{6-4}$$

例 1 某医院对 20 位病人手术后的生存时间进行了调查,记录如下(单位:年):

11, 11, 11^+, 7^+, 7, 4, 4^+, 4, 12^+, 3,
13, 13^+, 13, 13, 16, 15, 15^+, 15, 16, 13.

以上记录中带上标 + 号者为右删失数据.试估计生存函数和平均生存时间.

解 为了得到生存函数 $S(t)$ 的乘积限估计,将数据从小到大排列,得

3, 4, 4, 4^+, 7, 7^+, 11, 11, 11^+, 12^+,
13, 13, 13, 13, 13^+, 15, 15, 15^+, 16, 16.

由公式(6-3),得

$$\widehat{S}(3) = \frac{19}{20} = 0.950,$$

$$\widehat{S}(4) = \frac{19}{20} \times \frac{18}{19} \times \frac{17}{18} \times \left(\frac{16}{17}\right)^0 = 0.850,$$

$$\widehat{S}(7) = \widehat{S}(4)\,\frac{15}{16} \times \left(\frac{14}{15}\right)^0 = 0.797,$$

$$\widehat{S}(11)=\widehat{S}(7)\times\frac{13}{14}\times\frac{12}{13}\times\left(\frac{11}{12}\right)^0=0.683,$$

$$\widehat{S}(12)=\widehat{S}(11)\times\left(\frac{10}{11}\right)^0=0.683,$$

$$\widehat{S}(13)=\widehat{S}(12)\times\frac{9}{10}\times\frac{8}{9}\times\frac{7}{8}\times\frac{6}{7}\times\left(\frac{5}{6}\right)^0=0.410,$$

$$\widehat{S}(15)=\widehat{S}(13)\times\frac{4}{5}\times\frac{3}{4}\times\left(\frac{2}{3}\right)^0=0.246,$$

$$\widehat{S}(16)=0.$$

于是,有

$$\widehat{S}(t)=\begin{cases}1 & (0\leqslant t<3),\\ 0.950 & (3\leqslant t<4),\\ 0.850 & (4\leqslant t<7),\\ 0.797 & (7\leqslant t<11),\\ 0.683 & (11\leqslant t<13),\\ 0.410 & (13\leqslant t<15),\\ 0.246 & (15\leqslant t<16),\\ 0 & (t\geqslant 16).\end{cases}$$

由式(6-4)可知,平均生存时间 ≈ 12.12(年).

乘积限估计是有严格的数学基础的.现已经证明,在十分广泛的条件下,只要样本量足够大,$\widehat{S}(t)$ 与 $S(t)$ 的真值可任意接近.

6.3　特恩伯估计

如果在一组数据中既有寿终数据和右删失数据,又含有左删失数据,怎样对生存函数进行估计呢?特恩伯(B.W.Turnbull)就分组数据的情形提出了一个估计方法;在此基础上,又有人就非分组数据情形给出了估计法.两个情形下的估计法在数学上是相似的,统称为**特恩伯估计**.

6.3.1　非分组数据情形下的生存函数估计

假设寿命变量 T 有 n 个观测值 $W_1,W_2,\cdots,W_n$,其中有寿终数据、右删失数据和左删失数据.记数据中的最小值为 t_1,除去 t_1 后剩下数据中互异的寿终数据为 $t_2<t_3<\cdots<t_m$.记 $t_{m+1}=\infty$,$I_j=[t_j,t_{j+1})(j=1,2,\cdots,m)$.注意:$t_1$ 不一定是寿终数据.用 d_j 表示属于区间 I_j 的寿终数据个数,λ_j 表示属于区间 I_j 的右删失数据个数,μ_j 表示属于区间 I_j 的左删失数据个数,$j=1,2,\cdots,m$.

定义 2　设 $\widehat{\theta}_1,\widehat{\theta}_2,\cdots,\widehat{\theta}_m$ 是函数

$$L(\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_m)=\prod_{j=1}^{m}(\theta_{j-1}-\theta_j)^{d_j}\theta_j^{\lambda_j}(1-\theta_j)^{\mu_j}\qquad(\theta_0=1)\qquad(6\text{-}5)$$

在闭区域 $D = \{(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_m): 1 \geqslant \theta_1 \geqslant \theta_2 \geqslant \cdots \geqslant \theta_m \geqslant 0\}$ 上的最大值点，则生存函数 $S(t) = P(T > t)$ 的特恩伯估计为

$$\widehat{S}(t) = \begin{cases} 1 & (\text{当 } t \in [0, t_1) \text{ 时}), \\ \widehat{\theta}_j & (\text{当 } t \in [t_j, t_{j+1}) \text{ 时}, \end{cases} \tag{6-6}$$

其中 $j = 1, 2, \cdots, m$.

寻求 $\widehat{\theta}_1, \widehat{\theta}_2, \cdots, \widehat{\theta}_m$ 的有效方法是存在的[1]. 北京大学概率统计系已编制了特恩伯估计的计算软件.

例 2 设对某种产品的寿命进行观测，得到了 20 个数据（单位：100 h）：

0.201, 0.550, 0.555, 0.571, 0.665, 1.280, 1.492,
1.904, 2.243, 2.515, 3.812, 3.868, 0.202^-, 0.560^-,
0.945^-, 1.582^-, 0.405^+, 0.541^+, 0.561^+, 0.381^+.

其中带上标"–"号者为左删失数据，带上标"+"号者为右删失数据，求其特恩伯估计.

解 这 20 个数据中最小数是 $t_1 = 0.201$，其他寿终数据是 $t_2 = 0.550, \cdots, t_{12} = 3.868$（从小到大排列）. 计算各区间上的统计量 $\alpha_j, \lambda_j, \mu_j$，可以求出函数 $L(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_{12})$ 的最大值点 $(\widehat{\theta}_1, \widehat{\theta}_2, \cdots, \widehat{\theta}_{12})$：

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\widehat{\theta}_j$	0.85	0.75	0.66	0.57	0.48	0.41	0.33	0.27	0.20	0.13	0.07	0

于是根据式(6-6)，就可得到 $S(t)$ 的估计值.

6.3.2 分组数据情形下的生存函数估计

在科学实验或现场跟踪调查工作中，常常遇到分组数据的处理问题. 为了估计寿命变量 T 的生存函数，随机抽取 n 个个体，并在时刻 $t_1 < t_2 < \cdots < t_m$（m 个预先指定的正数）观测其寿命. 以下记 $t_0 = 0, t_{m+1} = \infty, I_j = (t_{j-1}, t_j], j = 1, 2, \cdots, m + 1$. 只可得到下列类型的数据：

(1) 确知在 I_j 中寿终的个体数 $d_j, j = 1, 2, \cdots, m + 1$;

(2) 未知在哪个区间 I_j 中寿终，仅知其寿命大于 t_j（但不知道是否大于 t_{j+1}）的个体数 $\lambda_j, j = 1, 2, \cdots, m - 1$;

(3) 未知在哪个区间 I_j 中寿终，仅知其寿命不超过 t_j（但不知道是否不超过 t_{j-1}）的个体数 $\mu_j, j = 2, 3, \cdots, m$.

定义 3 设 $(\widehat{\theta}_1, \widehat{\theta}_2, \cdots, \widehat{\theta}_m)$ 是似然函数

$$L(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_m) = \prod_{j=1}^{m+1} (\theta_{j-1} - \theta_j)^{d_j} \prod_{j=1}^{m-1} \theta_j^{\lambda_j} \prod_{j=2}^{m} (1 - \theta_j)^{\mu_j} \tag{6-7}$$

$(\theta_0 = 1, \theta_{m+1} = 0)$ 在闭区域 $D = \{(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_m): 1 \geqslant \theta_1 \geqslant \cdots \geqslant \theta_m \geqslant 0\}$ 上的最大值点，令

$$\widehat{S}(t) = \begin{cases} 1 & (\text{当 } t \in [0, t_1) \text{ 时}), \\ \widehat{\theta}_j & (\text{当 } t \in [t_j, t_{j+1}) \text{ 时}), \end{cases} \tag{6-8}$$

其中 $j=1,2,\cdots,m$，这就是 $S(t)$ 的特恩伯估计.

可以证明，函数 $L(\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_m)$ 的最大值点 $(\hat{\theta}_1,\hat{\theta}_2,\cdots,\hat{\theta}_m)$ 永远存在，且是方程组

$$-\frac{d_j}{\theta_{j-1}-\theta_j}+\frac{d_{j+1}}{\theta_j-\theta_{j+1}}+\frac{\lambda_j}{\theta_j}-\frac{\mu_j}{1-\theta_j}=0 \qquad (j=j_1,j_1+1,\cdots,j_2)$$

在约束条件 $1=\theta_0=\cdots=\theta_{j_1-1}>\theta_{j_1}>\cdots>\theta_{j_2}>\theta_{j_2+1}=\cdots=\theta_{m+1}=0$ 下的唯一解，其中

$$j_1=\min\{j:d_j\neq 0 \text{ 或 } \mu_j\neq 0\},$$
$$j_2=\max\{j:d_{j+1}\neq 0 \text{ 或 } \lambda_j\neq 0\}.$$

特恩伯估计是有严格理论根据的. 现已经证明，在十分广泛的条件下，只要样本量足够大，非分组数据情形下的特恩伯估计 $\hat{S}(t)$ 与 $S(t)$ 的真值可任意接近，而分组数据情形下的特恩伯估计 $\hat{S}(t_j)$ 与 $S(t_j)$ 的真值可任意接近 $(j=1,2,\cdots,m)$.

7 含协变量的生存分析

在某些实际工作中，不仅要考虑随机因素对寿命(生存时间)的影响，而且还要考虑其他系统性因素对寿命的影响. 这些系统性因素就是第 1 章里所说的协变量. 下面用 $\boldsymbol{X}=(x_1,x_2,\cdots,x_p)^{\mathrm{T}}$ 表示协变量(向量)，研究寿命 T 对 $\boldsymbol{X}$ 的依赖关系. 本章只考虑实际工作中最常遇到的三种回归模型.

7.1 位置刻度模型

设寿命变量 T 与协变量 $\boldsymbol{X}$ 有下列关系式:

$$\ln T=\mu(\boldsymbol{X})+\sigma\varepsilon, \tag{7-1}$$

其中 $\mu(\cdot)$ 是未知函数；σ 是未知的正数，ε 的分布函数是 $G(x)$，$G(x)$ 和 $\mu(\cdot)$ 都与 σ 无关. 此时，T 的生存函数为

$$S(t\mid \boldsymbol{X})=\overline{G}\left(\frac{\ln t-\mu(\boldsymbol{X})}{\sigma}\right), \tag{7-2}$$

其中 $\overline{G}=1-G$. 式(7-2)就称为**位置刻度模型**.

这种模型是广泛存在的. 例如，若 T 服从韦布尔分布，且协变量不影响形状参数，只影响位置参数，则其生存函数就属于上述模型，其中 $G(x)=1-\exp(-\exp x)$. 又如，若 T 服从对数正态分布，且协变量只影响 $\ln T$ 的均值而不影响 $\ln T$ 的方差，则其生存函数也属于这种模型，这时 $G(x)$ 是标准正态分布函数.

假设 $G(x)$ 有密度函数 $g(x)$. 下面只考虑

$$\mu(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}$$

的情形，其中 $\boldsymbol{X}=(x_1,x_2,\cdots,x_p)^{\mathrm{T}}$(记号 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 表示 $\boldsymbol{X}$ 的转置)；$\boldsymbol{\beta}=(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_p)^{\mathrm{T}}$ 是

未知参数向量.设对 n 个个体进行观测,第 i 个个体的寿命数据(寿终数据或右删失数据、左删失数据)是 t_i,相应的协变量的值是

$$X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip})^{\mathrm{T}}.$$

令

$$D = \{i: 1 \leqslant i \leqslant n, t_i \text{ 是寿终数据}\},$$
$$C = \{i: 1 \leqslant i \leqslant n, t_i \text{ 是右删失数据}\},$$
$$C^* = \{i: 1 \leqslant i \leqslant n, t_i \text{ 是左删失数据}\}.$$
$$Y = \ln T, \quad y_i = \ln t_i \qquad (i = 1, 2, \cdots, n),$$

于是数据 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 对应的似然函数是

$$L(\boldsymbol{\beta}, \sigma) = \prod_{i \in D} \frac{1}{\sigma} g\left(\frac{y_i - X_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}}{\sigma}\right) \prod_{i \in C} \bar{G}\left(\frac{y_i - X_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}}{\sigma}\right) \prod_{i \in C^*} G\left(\frac{y_i - X_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}}{\sigma}\right).$$

解似然方程组

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \ln L(\boldsymbol{\beta}, \sigma)}{\partial \beta_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \cdots, p). \\ \dfrac{\partial \ln L(\boldsymbol{\beta}, \sigma)}{\partial \sigma} = 0, \end{cases}$$

就可得到 $\boldsymbol{\beta}, \sigma$ 的最大似然估计 $\hat{\beta}, \hat{\sigma}$.劳勒斯(J.F.Lawless)[5] 就指数分布、韦布尔分布、对数正态分布等且不含左删失数据的情形,具体写出了似然方程组及信息矩阵,并讨论了回归系数 $\boldsymbol{\beta}$ 的假设检验.应该指出,在上面的讨论中,假定了 ϵ 的分布是完全知道的.若 ϵ 的分布不知道,则不能用上述方法,而要用别的方法.

7.2 右删失数据情形下的回归分析

设线性回归模型为

$$y = \alpha + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_p x_p + \epsilon, \tag{7-3}$$

其中 ϵ 是随机项;$E\epsilon = 0$;$\alpha, \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_p$ 是待估的参数.但对 y(如寿命变量或其对数)不一定有完全观测值.

假设对自变量 $x_1, x_2, \cdots, x_p$ 和因变量 y 得到 n 组观测值:

$$(x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip}, y_i, \delta_i) \qquad (i = 1, 2, \cdots, n),$$

其中 $\delta_i = 0$ 或 1;y_i 是 $x_1 = x_{i1}, x_2 = x_{i2}, \cdots, x_p = x_{ip}$ 时 y 的观测值;$\delta_i = 1$ 时表示 y_i 是非删失数据,$\delta_i = 0$ 时表示 y_i 是右删失数据.

此时应如何估计 α 和 $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_p$ 呢?这个重要问题从 20 世纪 70 年代至 90 年代有很多研究,已提出了多种估计方法,下面介绍其中比较简单效果也较好的一种:巴克利(Buckley)和詹姆斯(James)方法(简称 **B-J 方法**).令

$$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip})^{\mathrm{T}} \quad (i = 1, 2, \cdots, n),$$

对于任何 $\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_p)^{\mathrm{T}}$,令

$$Z_i(\boldsymbol{b}) = y_i - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_i \quad (i = 1, 2, \cdots, n),$$

$$Z_n(\boldsymbol{b},t) = \#\{j:1 \leqslant j \leqslant n, Z_j(\boldsymbol{b}) \geqslant t\},$$

其中 $\# A$ 表示集合 A 的元素个数;

$$\widehat{F}_{nb}(u) = 1 - \prod_{i:Z_i(\boldsymbol{b}) \leqslant u} \left\{1 - \frac{1}{Z_n(\boldsymbol{b}, Z_i(\boldsymbol{b}))}\right\}^{\delta_i};$$

$$y_i^*(\boldsymbol{b}) = Z_i(\boldsymbol{b}) + (1-\delta_i)\int_{Z_i(\boldsymbol{b})}^{\infty}(1-\widehat{F}_{nb}(s))\mathrm{d}s/(1-\widehat{F}_{nb}(Z_i(\boldsymbol{b})));$$

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{ij}, \bar{\boldsymbol{x}} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \cdots, \bar{x}_p)^{\mathrm{T}};$$

$$\psi_n(\boldsymbol{b}) = \sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}} y_i^*(\boldsymbol{b}).$$

若向量的长度 $\|\psi_n(\boldsymbol{b})\|$ 在 $\boldsymbol{b} = (\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \cdots, \widehat{\beta}_p)^{\mathrm{T}}$ 时达到最小(或接近最小),则称 $\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \cdots, \widehat{\beta}_p$ 分别是回归系数 $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_p$ 的 B-J 估计. α 的估计为

$$\widehat{\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} x \mathrm{d}F_{n\widehat{\boldsymbol{\beta}}}(x),$$

其中 $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = (\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \cdots, \widehat{\beta}_p)^{\mathrm{T}}$. 可用迭代算法计算 B-J 估计 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$. 北京大学概率统计系已编有用迭代算法计算 B-J 估计 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ 的计算软件.

例 1 在研究产品的加速寿命试验时获得表 7-1 所列数据,其中 t 是寿命变量,T 是温度变量.

解 根据有右删失数据情形下的回归分析,及表 7-1 的数据,可假定线性回归模型为

$$y = \alpha + \beta X + \epsilon,$$

用 B-J 方法,可得到线性回归模型中 β 及 α 的估计量: $\widehat{\beta} = 1.080\,493$, $\widehat{\alpha} = 0.827\,084$.

表 7-1

$y = \ln t$	是否右删失	$X = 1/T$
4.00	0	3.00
3.82	0	2.80
3.70	0	2.60
2.95	0	1.90
2.52	0	1.50
2.33	0	1.30
1.84	1	1.00
1.70	1	0.80
1.49	1	0.60
1.40	1	0.50

注:0 表示右删失,1 表示完全数据

7.3 比例危险率模型

设协变量为 $\boldsymbol{X}$ 时,寿命 T 的生存函数和危险率函数分别是 $S(t \mid \boldsymbol{X})$ 和 $\lambda(t \mid \boldsymbol{X})$. 若比值 $\lambda(t \mid \boldsymbol{X}_2)/\lambda(t_1, \boldsymbol{X}_1)$ 与 t 无关,则称寿命 T 与协变量 $\boldsymbol{X}$ 的关系适合**比例危险率模型**. 此时 T 的危险率有下列形式:

$$\lambda(t \mid \boldsymbol{X}) = \lambda_0(t)g(\boldsymbol{X}),$$

其中 $\lambda_0(t)$ 叫做基准危险率. 令

$$S_0(t) = \exp\left(-\int_0^t \lambda_0(u)\mathrm{d}u\right),$$

则

$$S(t \mid \boldsymbol{X}) = (S_0(t))^{g(\boldsymbol{X})}. \tag{7-4}$$

在许多实际问题中,$g(\boldsymbol{X})$ 常取参数形式:$g(\boldsymbol{X}) = g_0(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{\beta})$,这里 g_0 是已知函数,$\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_p)^{\mathrm{T}}$ 是未知参数向量. 此时式(7-4) 叫做广义考克斯(D.R.Cox) 模型. 当 $g_0(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{\beta}) = \exp(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta})$ 时,式(7-4) 是著名的**考克斯模型**. 在广义考克斯模型中有两个未知的东西:参数 $\boldsymbol{\beta}$ 和基准生存函数 $S_0(t)$,因而式(7-4) 是一种半参数模型.

设对 n 个个体的寿命进行观测,允许有右删失数据出现;第 i 个个体的协变量值是 $\boldsymbol{X}_i$,寿命数据是 t_i,当 t_i 是非删失数据时,$\delta_i = 1$,当 t_i 是右删失数据时,$\delta_i = 0$. 于是观测数据为

$$(t_i, \delta_i, \boldsymbol{X}_i) \qquad (i = 1, 2, \cdots, n).$$

将互异的寿终数据从小到大排列:$t_{(1)} < t_{(2)} < \cdots < t_{(\tau)}$,令

$$\boldsymbol{D}_j = \{i : \delta_i = 1 \text{ 且 } t_i = t_{(j)}\},$$

$$d_j = \# \boldsymbol{D}_j,$$

其中 $\# \boldsymbol{D}_j$ 表示 $\boldsymbol{D}_j$ 所含元素个数,

$$\boldsymbol{C}_j = \{i : \delta_i = 0 \text{ 且 } t_i \in [t_{(j)}, t_{(j+1)})\} \quad (j = 0, 1, 2, \cdots, \tau, t_{(0)} \xlongequal{\text{def}} 0, t_{(\tau+1)} \xlongequal{\text{def}} \infty).$$

$$\boldsymbol{R}_j = \{i : t_i \geqslant t_{(j)}\} \quad (j = 1, 2, \cdots, \tau).$$

$\boldsymbol{R}_j$ 叫做 $t_{(j)}$ 时刻的风险集,即在 $t_{(j)}$ 时刻之前未寿终且未删失的个体之集. 显然

$$\boldsymbol{R}_j = \bigcup_{i=j}^{\tau}(\boldsymbol{D}_i \cup \boldsymbol{C}_i).$$

为了估计广义考克斯模型

$$S(t \mid \boldsymbol{X}) = [S_0(t)]^{g_0(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{\beta})} \tag{7-5}$$

中的参数 $\boldsymbol{\beta}$,考克斯提出了"**部分似然函数**":令

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{\beta}) = \prod_{j=1}^{\tau}\left[\frac{\prod_{i \in D_j} g_0(\boldsymbol{X}_i, \boldsymbol{\beta})}{\left[\sum_{i \in R_j} g_0(\boldsymbol{X}_i, \boldsymbol{\beta})\right]^{d_j}}\right], \tag{7-6}$$

找出 $\hat{\beta}$,使得 $L(\boldsymbol{\beta})$ 在 $\hat{\beta}$ 达到最大值,那么,即可用这个 $\hat{\beta}$ 作为 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计量(考克斯估

计).

怎样估计式(7-5)中的 $S_0(t)$ 呢?其估计量 $\widehat{S}_0(t)$ 是下降的阶梯函数,记

$$P_j = \widehat{S}_0(t_{(j)}), \quad \alpha_j = \frac{P_j}{P_{j-1}} \qquad (j = 1,2,\cdots,\tau),$$

$P_0 = 1$,这些 α_j 是方程组

$$\sum_{l \in D_j} \frac{g_0(X_l,\widehat{\beta})}{1 - \alpha_j^{g_0(X_l,\widehat{\beta})}} = \sum_{l \in R_j} g_0(X_l,\widehat{\beta}) \qquad (j = 1,2,\cdots,\tau)$$

的根.当 $d_j = 1$ 时,根 α_j 有显式表达;当 $d_j > 1$ 时,要用迭代法求解.由于 $P_j = \alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_j$,故 $S_0(t)$ 的估计量可取为

$$\widehat{S}_0(t) = \prod_{t_{(j)} \leq t} \alpha_j.$$

8 可靠性增长

8.1 概 述

在产品的研制过程中,通过"试验—故障分析—纠正措施—再试验"的循环,不断在产品的设计、工艺或材料上进行改进,从而使产品的固有可靠性逐步提高,即是所谓**可靠性增长**.可靠性增长试验是一个工程技术问题,如何安排试验,才有利于暴露产品的缺陷,如何制定纠正措施,都涉及大量专业知识和已有的经验,非高水平的专业人员不能胜任.但在试验过程中如何对已积累的故障数据进行分析,如何推断可靠性的增长情况,则涉及到如何正确地使用数学方法的问题.

设可靠性增长试验从时刻 0 开始进行,将观测到的故障时间(时刻)从小到大排列:$\tau_1 < \tau_2 < \cdots$ 用 $N(t)$ 表示在时间区间$[0,t]$中的故障次数,即在$(0,t]$中 τ_i 的个数.$(N(t), t \geq 0)$ 是一个随机过程(计数过程),$\sigma_n = \tau_n - \tau_{n-1}(\tau_0 = 0)$ 是第 n 个故障间隔.在实践中较常遇到的一种情形是:$(N(t), t \geq 0)$ 是所谓泊松(Poisson)过程,即满足

(1) 过程是独立增量的,即对于一切 $0 \leq t_1 < t_2 < \cdots < t_n$,随机变量

$$N(t_1), N(t_2) - N(t_1), \cdots, N(t_n) - N(t_{n-1})$$

是相互独立的;

(2) 存在连续增函数 $\Lambda(t)$,$\Lambda(0) = 0$,满足对于一切 $0 \leq s < t$ 及非负整数 i,成立

$$P(N(t) - N(s) = i) = \frac{1}{i!}(\Lambda(t) - \Lambda(s))^i \exp(-(\Lambda(t) - \Lambda(s))).$$

当 $\Lambda(t) = \int_0^t \lambda(u)\mathrm{d}u, \forall t \geq 0$ 时,$\lambda(t)$ 称为强度函数.当 $\lambda(t) \equiv \lambda$(正数)时,

$(N(t), t \geq 0)$ 叫齐次泊松过程，这时各间隔 $\{\sigma_n, n \geq 1\}$ 是相互独立的随机变量，且服从相同的指数分布．在可靠性增长试验的工程实际中，常遇到两种非齐次泊松过程：AMSAA 模型和指数多项式模型．

8.2　AMSAA 模型

定义 1　若逐次发生的故障时刻形成的计数过程 $(N(t), t \geq 0)$ 是泊松过程，且强度函数为

$$\lambda(t) = \lambda\beta t^{\beta-1} \qquad (\forall t \geq 0, \beta > 0, \lambda > 0),$$

则称可靠性增长符合 **AMSAA** 模型(即所谓韦布尔过程)．

此时 $M(t) = (\lambda(t))^{-1}$ 为时刻 t 时的 MTBF 值．

设 T 是观测停止时间，$\tau_1 < \tau_2 < \cdots$ 是逐次故障时刻，则 β 和 λ 的最大似然估计分别为

$$\hat{\beta} = \frac{N(T)}{\sum_{i=1}^{N(T)} \ln\left(\frac{T}{\tau_i}\right)}, \quad \hat{\lambda} = N(T) T^{-\hat{\beta}}.$$

$M(T)$ 的点估计为

$$\hat{M}(T) = (\hat{\lambda}\hat{\beta} T^{\hat{\beta}-1})^{-1}.$$

在实际工作中最常见的是定时截尾和定数截尾两种情形．

8.2.1　定时截尾情形

在定时截尾情形，$T \equiv t_0$(固定正数)，故

$$\hat{\beta} = \frac{N(t_0)}{\sum_{i=1}^{N(t_0)} \ln\left(\frac{t_0}{\tau_i}\right)}, \quad \hat{\lambda} = N(t_0) t_0^{-\hat{\beta}},$$

当 $N(t_0) = 0$ 时，规定 $\hat{\beta} = 1, \hat{\lambda} = 1$．

β 的 $1-\alpha$ 水平置信区间为

$$\left[\frac{\hat{\beta}}{2N(t_0)}\chi^2_{\frac{\alpha}{2}}(2N(t_0)), \frac{\hat{\beta}}{2N(t_0)}\chi^2_{1-\frac{\alpha}{2}}(2N(t_0))\right] \qquad (\text{当 } N(t_0) > 0 \text{ 时}),$$

其中 $\chi^2_\beta(m)$ 是 m 个自由度的 χ^2 分布的(下侧)β 分位数．

这个置信区间也可用来检验假设 $H_0: \beta = 1$．当 1 不在这个区间里时，应拒绝 H_0；否则，不应拒绝 H_0．当 H_0 被拒绝，且 $\hat{\beta} < 1$ 时，应拒绝"$\beta \geq 1$"，从而判定可靠性有增长．对 $M(t_0)$ 也可给出置信区间．

8.2.2　定数截尾情形

在定数截尾情形，$T = \tau_n (n \geq 2)$，其中 τ_n 是第 n 个故障时刻，故

$$\widehat{\beta}=\frac{n}{\sum_{i=1}^{n-1}\ln\frac{\tau_n}{\tau_i}},$$

$$\widehat{\lambda}=n\tau_n^{-\widehat{\beta}}.$$

β 的 $1-\alpha$ 水平置信区间为

$$\left[\frac{\widehat{\beta}}{2n}\chi^2_{\frac{\alpha}{2}}(2n-2),\frac{\widehat{\beta}}{2n}\chi^2_{1-\frac{\alpha}{2}}(2n-2)\right].$$

利用此区间可检验假设 $H_0:\beta=1$. 当1不在此区间里时,应拒绝 H_0;否则,不拒绝 H_0. 当拒绝 H_0,且 $\widehat{\beta}<1$ 时,应拒绝"$\beta\geqslant 1$",从而判定可靠性有增长. 对于 $M(\tau_n)$,也可给出置信区间.

8.3　指数多项式模型

定义 2　若逐次发生的故障时刻形成的计数过程$(N(t),t\geqslant 0)$是泊松过程,且强度函数为

$$\lambda(t)=\exp(\theta_0+\theta_1 t+\cdots+\theta_r t^r)\qquad (r\geqslant 0),$$

则称可靠性增长符合**指数多项式模型**.

$r=1$ 时,是考克斯首先考虑过的模型.

若试验的停止时间是 T,各次"故障时刻"是 $\tau_1<\tau_2<\cdots<\tau_{N(T)}$,则 $\theta_0,\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_r$ 的最大似然估计 $\widehat{\theta}_0,\widehat{\theta}_1,\cdots,\widehat{\theta}_r$ 是似然方程组

$$\sum_{i=1}^{N(T)}\tau_i^k-\int_0^T u^k\exp\Big(\sum_{i=0}^{r}\theta_i u^i\Big)\mathrm{d}u=0\qquad (k=0,1,\cdots,r)$$

的根.

应指出的是,这个方程组有解的充分必要条件是 $N(T)>\frac{r+1}{2}$ 或者 $N(T)=\frac{r+1}{2}$,$\tau_{N(T)}\neq T^{[1]}$,而且有解时解只有一个. 只要 T 足够大,最大似然估计一定存在.

若多项式的阶 r 未知,只能靠数据来确定,则可用估计量

$$\widehat{r}=\max\left(0,\left[\frac{1}{\ln T}\ln\left(\frac{N(T)}{\sum_{i=1}^{N(T)}(T-\tau_i)}\right)+\frac{3}{2}\right]\right),$$

其中$[a]$表示不超过 a 的最大整数.

8.4　软件可靠性

在研制计算机软件时,都要对已编出的软件进行测试,一旦发现错误就要采取纠正或改进措施. 因此,软件可靠性模型是一种可靠性增长模型. **软件可靠性**的研

究是普遍关注的,尚处于初级阶段.怎样定义软件的可靠度?尚无统一的公认的定义.下面说的只是一种定义.

定义 3 设软件在测试过程中逐次出现错误(或故障)的时刻为 $\tau_1 < \tau_2 < \cdots$,仍用 $N(t)$ 表示时间区间 $(0,t]$ 上的错误个数.若在测试停止时间 T 完成了研制工作,R 为软件在时间 T 交付使用后到 $T+V$ 仍不出错误(或故障)的概率,即

$$R = P(N(T+V) - N(T) = 0), \tag{8-1}$$

则称 R 为**软件的可靠度**,其中 V 是所谓的任务时间.

人们关心 R 的点估计和置信下限.这需要对计数过程 $(N(t), t \geqslant 0)$ 有所假定,因而有多种软件可靠性模型.在这些模型中较有代表性的有 G-O 模型、S 曲线模型和 J-M 模型,分别介绍如下.

8.4.1 G-O 模型

定义 4 假设 $(N(t), t \geqslant 0)$ 是非齐次泊松过程,其均值函数为

$$\Lambda(t) = a(1 - \exp(-bt)) \qquad (t \geqslant 0, a > 0, b > 0),$$

这时说软件可靠性符合 G-O 模型.由式(8-1),有

$$R = \exp(-a\exp(-bT)(1 - \exp(-bV))).$$

设测试停止时间是 T,对于观测数据:$N(T), \tau_1, \tau_2, \cdots, \tau_{N(T)}$,令

$$S = \begin{cases} \dfrac{1}{N(T)}\sum_{i=1}^{N(T)} \dfrac{\tau_i}{T} & (\text{当 } N(T) \neq 0 \text{ 时}), \\ 0 & (\text{当 } N(T) = 0 \text{ 时}), \end{cases} \tag{8-2}$$

$$H(b) = \frac{1}{bT} - (\exp(bT) - 1)^{-1},$$

设 $\hat{b}$ 是方程 $H(b) = S$ 的根(当 $0 < S < \frac{1}{2}$ 时根存在且唯一),$\hat{a} = N(T)/(1 - \exp(-\hat{b}T))$,则 $\hat{a}, \hat{b}$ 分别是 a, b 的最大似然估计.软件可靠度 R 的置信下限也可计算出来.

8.4.2 S 曲线模型

定义 5 假设 $(N(t), t \geqslant 0)$ 是非齐次泊松过程,其均值函数为

$$\Lambda(t) = a(1 - (1 + bt)\exp(-bt)) \qquad (t \geqslant 0, a > 0, b > 0),$$

这时说软件可靠性符合 S 曲线模型.由式(8-1),有

$$R = \exp(-a\exp(-bT)(1 + bT - (1 + bT + bV)\exp(-bV))),$$

$$S = \frac{1}{N(T)}\sum_{i=1}^{N(T)} \frac{\tau_i}{T},$$

$$G(b) = \frac{2}{bT} - \frac{bT}{\exp(bT) - (1 + bT)}.$$

设 $\hat{b}$ 是方程 $G(b) = S$ 的根(当 $S \in (0, \frac{2}{3})$ 时根存在且唯一),

$$\hat{a} = N(T)/(1 - (1 + \hat{b}T)\exp(-\hat{b}T)),$$

则 $\widehat{a}$,$\widehat{b}$分别是 a,b 的最大似然估计.软件可靠度 R 的置信下限也可给出.

8.4.3 J-M 模型

定义 6 假设软件中的错误个数是正整数 N(未知数),错误(或故障)间隔 t_1,t_2,⋯ 是相互独立的随机变量,而且 t_i 服从指数分布

$$P(t_i \leqslant t) = 1 - \exp(-\lambda_i t) \quad (t \geqslant 0),$$

其中 $\lambda_i = (N - i + 1)\varphi$,$\varphi$ 是未知的正数,$i = 1,2,\cdots,N$. 这时称软件可靠性符合 $J - M$ 模型.

由式(8-1),有

$$R = \exp(-\lambda_{n+1} V),$$

若有数据 $t_1,t_2,\cdots,t_n$,如何估计 N,φ 及软件可靠度 R(即 t_{n+1} 大于 V 的概率).

令

$$p = \frac{\sum_{i=1}^{n}(i-1)t_i}{\sum_{i=1}^{n}t_i},$$

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x-i+1} - \frac{n}{x-p} \qquad (x > n-1),$$

可以证明:

(1) 当 $p \leqslant \frac{n-1}{2}$ 时,N,φ 之最大似然估计不存在;

(2) 当 $\frac{n-1}{2} < p \leqslant n\left(1 - \left(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{i}\right)^{-1}\right)$ 时,N 的最大似然估计 $\widehat{N}$ 是方程 $f(x) = 0$ 的唯一根,φ 的最大似然估计 $\widehat{\varphi} = n\Big/\sum_{i=1}^{n}(\widehat{N} - i + 1)t_i$,$\lambda_{n+1}$ 的最大似然估计

$$\widehat{\lambda}_{n+1} = \frac{(\widehat{N} - n)n}{\sum_{i=1}^{n}(\widehat{N} - i + 1)t_i},$$

由此即可得到 R 的点估计;

(3) 当 $p > n\left(1 - \left(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{i}\right)^{-1}\right)$ 时,N,λ_{n+1} 的最大似然估计分别为

$$\widehat{N} = n,\widehat{\lambda}_{n+1} = 0.$$

也可给出软件可靠度 R 的置信下限.

9 系统可靠性的数学模型

9.1 概 述

一个系统就是由一些部件(这些部件可能是物,也可能是人)组成的具有某种规定功能的整体.这些组成部件也叫做系统的单元.系统与单元的概念是相对的,二者的关系是多种多样的.每个单元又可分为若干个小单元.小单元可再分为更小的单元,更小单元还可继续分下去……整个系统的结构关系可能很复杂.在实际工作中,有时要把一个复杂的产品(例如电视机、导弹)看成许多部件组成的系统,希望从各部件的寿命与可靠性去计算或推断整个产品的寿命与可靠性.另一方面,由若干个部分构成的"系统"(如供电网、通信网)本身就是重要的研究对象.

系统由若干个单元组成.每个单元只有两种可能状态:正常、失效."正常"表示正常工作,即能完成规定的功能;"失效"(或称故障)表示不能完成(或丧失)规定的功能.对于一般的系统,也只考虑两种可能的状态:正常、失效.对于网络系统,状态的定义有所不同,见9.4节.

从是否考虑维修的角度来看,系统可分为不修系统和可修系统两大类.**不修系统**是指系统即使失效也不对部件进行维修(包括更换).不进行维修的原因多种多样,有的是技术上的原因,不可能维修;有的是经济上的原因,不值得维修.用 T 表示不修系统的寿命(从开始工作到失效为止的持续时间),则 $P(T > t)$ 就是系统在时刻 t 的可靠度.

可修系统是指系统正常工作一段时间后,若出现失效(或故障),则经过维修(包括更换部件)使之又恢复到工作状态,如此"正常—修理—正常—修理"循环下去.用 $X(t)$ 表示可修系统在时刻 t 的状态,$X(t) = 1$ 或0,其中1表示正常,0表示系统处于修理中(非正常工作状态),称 $A(t) = P(X(t) = 1)$ 为系统的**可用度**.若极限 $A^* = \lim\limits_{t\to\infty}A(t)$ 存在,则称 A^* 为系统的**稳态可用度**.

可用度和稳态可用度是可修系统的两个重要可靠性指标.研究可修系统的基本任务之一是要计算或评估这两个指标;另一项任务是研究什么样的维修策略是最可取的(最优的或近似最优的).由于系统的结构复杂,各部件的失效情况不相同,各部件失效后的修理时间长短又不一,因此,可修系统的研究比较复杂,要运用到随机过程的方法和理论,以及运筹学,请看文献[2].下面只讨论不修系统.

9.2 基本的不修系统

9.2.1 串联系统

所谓串联系统是指系统由 n 个部件组成,当且仅当所有部件都正常时系统才

正常.

设第 i 个部件的寿命为 $T_i(i=1,2,\cdots,n)$,则系统的寿命

$$T=\min(T_1,T_2,\cdots,T_n),$$

于是

$$R(t)=P(T>t)=\prod_{i=1}^{n}R_i(t) \tag{9-1}$$

是系统的可靠度.这里 $R_i(t)$ 是第 i 个部件的可靠度.当第 i 个部件的失效率是 $\lambda_i(t)$ 时,

$$R(t)=\exp\left(-\int_0^t\sum_{i=1}^{n}\lambda_i(u)\mathrm{d}u\right),$$

系统的失效率为

$$\lambda(t)=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i(t),$$

系统的平均寿命

$$\overline{T}=\int_0^{\infty}R(t)\mathrm{d}t.$$

当第 i 个部件寿命服从参数为 λ_i 的指数分布 $(i=1,2,\cdots,n)$ 时,有

$$R(t)=\exp\left(-\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\right)t\right),$$

系统平均寿命

$$\overline{T}=\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\right)^{-1}.$$

9.2.2　冗余系统

为了提高系统的可靠性,常在系统中增加一些似乎多余的部件.

1.并联系统

并联系统是指系统由 n 个部件组成,当且仅当所有部件都失效时系统才失效.设第 i 个部件的寿命是 $T_i(i=1,2,\cdots,n)$,则并联系统的寿命为

$$T=\max(T_1,T_2,\cdots,T_n),$$

系统的可靠度为

$$R(t)=P(T>t)=1-\prod_{i=1}^{n}(1-R_i(t)), \tag{9-2}$$

其中 $R_i(t)=P(T_i>t)$ 是第 i 个部件的可靠度.

当第 i 个部件的寿命服从参数为 λ_i 的指数分布 $(i=1,2,\cdots,n)$ 时,

$$R(t)=1-\prod_{i=1}^{n}(1-\exp(-\lambda_i t)),$$

系统的平均寿命

$$\overline{T}=\sum_{k=1}^{n}(-1)^{k-1}\sum_{1\le i_1<\cdots<i_k\le n}(\lambda_{i_1}+\lambda_{i_2}+\cdots+\lambda_{i_k})^{-1}.$$

2. 表决系统

表决系统是指，系统由 n 个部件组成，当且仅当 n 个部件中至少有 $k(1 \leqslant k \leqslant n)$ 个部件正常时系统才正常. 这种系统简记为 $k/n(G)$ 系统. $k = 1$ 时就是并联系统. 若 n 个部件的寿命分别是 $T_1, T_2, \cdots, T_n$，它们相互独立且服从同一分布，记 $R_1(t) = P(T_1 > t)$（每个部件的可靠度），则系统的可靠度

$$R(t) = \sum_{j=k}^{n} \binom{n}{j} (R_1(t))^j (1 - R_1(t))^{n-j}. \tag{9-3}$$

若所有 T_i 服从同一指数分布，失效率是 λ，则

$$R(t) = \sum_{j=k}^{n} \binom{n}{j} \exp(-j\lambda t)(1 - \exp(-\lambda t))^{n-j},$$

系统的平均寿命

$$\bar{T} = \lambda^{-1} \sum_{j=k}^{n} \frac{1}{j}.$$

9.2.3　贮备系统

为了提高系统的可靠度，除了多安排一些部件实施冗余技术外，还可贮备一些备件，以便当工作部件失效时，可立即由贮备部件来顶替. 这种系统称为贮备系统. 贮备系统又分为冷贮备系统和温贮备系统两种. 前者贮备部件在贮备期间性能不变坏，因而贮备期的长短对以后使用时的工作寿命没有影响；而后者贮备部件在贮备期间性能要变坏，因而贮备期的长短对以后使用时的工作寿命有影响. 此外，当工作部件失效时，贮备部件应立即转换为工作状态，这需要转接工作. 这种转接工作一般采用开关转接，于是又可分为开关完全可靠与开关不完全可靠等不同情形.

9.2.4　混联系统

一个实际的工程系统，为了提高可靠性，往往采用串联、冗余、贮备的混合结构形式. 如不考虑贮备，则这种具有串联和冗余混合结构的系统称为混联系统.

9.3　单调系统

设系统由 n 个部件组成，x_i 表示部件 i 的状态，即

$$x_i = \begin{cases} 1 & (\text{部件 } i \text{ 正常}), \\ 0 & (\text{部件 } i \text{ 失效}), \end{cases}$$

其中 $i = 1, 2, \cdots, n$，用 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 表示系统各部件的状态，

定义 1　令

$$\mathscr{X} = \{\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n) : x_i = 0 \text{ 或 } 1, i = 1, 2, \cdots, n\},$$

系统只有正常和失效这两个可能的状态. 设 $\mathscr{X}$ 上的函数 $\varphi(\boldsymbol{X})$ 为

$$\varphi(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & (\text{当各部件处于状态 } \boldsymbol{x} \text{ 时系统正常}), \\ 0 & (\text{当各部件处于状态 } \boldsymbol{x} \text{ 时系统失效}), \end{cases}$$

则 φ 叫做系统的结构函数.若对于一切 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)\leqslant\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)$,有 $\varphi(\boldsymbol{x})\leqslant\varphi(\boldsymbol{y})$,则称系统是**单调系统**.这里 $\boldsymbol{x}\leqslant\boldsymbol{y}$ 表示 $x_i\leqslant y_i$,对于一切 i 成立,而 $\boldsymbol{x}<\boldsymbol{y}$ 则表示 $\boldsymbol{x}\leqslant\boldsymbol{y}$,且至少有一个 j 使得 $x_j<y_j$.

例如,n 个部件的串联系统的结构函数为

$$\varphi(\boldsymbol{x})=\min(x_1,x_2,\cdots,x_n)=\prod_{i=1}^{n}x_i,$$

n 个部件的并联系统的结构函数为

$$\varphi(\boldsymbol{x})=\max(x_1,x_2,\cdots,x_n)=1-\prod_{i=1}^{n}(1-x_i),$$

$k/n(G)$ 表决系统的结构函数为

$$\varphi(\boldsymbol{x})=\begin{cases}1 & \left(\text{当}\sum_{i=1}^{n}x_i\geqslant k\text{ 时}\right),\\ 0 & (\text{否则}).\end{cases}$$

显然,这些系统都是单调的.

定义 2 设 φ 是一单调的结构函数,称

$$\varphi^D(\boldsymbol{x})=1-\varphi(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{x})$$

为 φ 的对偶函数.

对应于 φ^D 的系统称为对偶系统.这里 $\boldsymbol{1}-\boldsymbol{x}=(1-x_1,1-x_2,\cdots,1-x_n)$.

如果 $\varphi(\boldsymbol{x})=1$,则称状态向量 $\boldsymbol{x}$ 是系统的路向量.

定义 3 若 $\varphi(\boldsymbol{x})=1$,且对于一切 $\boldsymbol{y}<\boldsymbol{x}$,有 $\varphi(\boldsymbol{y})=0$,则称 $\boldsymbol{x}$ 是**最小路向量**(简称最小路).

若 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 是一最小路,则集合 $C_1(\boldsymbol{x})=\{i:x_i=1\}$ 称为**最小路集**,其元素个数叫做最小路的阶或长度.

如果 $\varphi(\boldsymbol{x})=0$,则称状态向量 $\boldsymbol{x}$ 是系统的割向量.

定义 4 若 $\varphi(\boldsymbol{x})=0$,且对于一切 $\boldsymbol{y}$,只要 $\boldsymbol{x}<\boldsymbol{y}$,就有 $\varphi(\boldsymbol{y})=1$,则称 $\boldsymbol{x}$ 是最小割向量(简称最小割).

若 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 是一**最小割向量**,则集合 $C_0(\boldsymbol{x})=\{i:x_i=0\}$ 称为**最小割集**,其元素个数叫做最小割的阶或长度.

例如,n 个部件的串联系统只有一个路向量 $\boldsymbol{x}=(1,1,\cdots,1)$,故只有一个最小路集 $\{1,2,\cdots,n\}$,而最小割集则有 n 个:$\{1\},\{2\},\cdots,\{n\}$;n 个部件的并联系统有 n 个最小路集:$\{1\},\{2\},\cdots,\{n\}$,只有一个最小割集 $\{1,2,\cdots,n\}$.

例 1 设有一个如图9-1所示的系统,由五个部件组成,图中 i 表示部件 A_i,A_1 与 A_2 并联,A_3 与 A_4 串联后再与 A_5 并联,第一方框部分与第二方框部分串联,求系统的最小路集和最小割集.

解 此系统的结构函数为

$$\varphi(x_1,x_2,\cdots,x_5)=(1-(1-x_1)(1-x_2))(1-(1-x_3x_4)(1-x_5)).$$

这个系统有四个最小路集 $\{1,3,4\},\{2,3,4\},\{1,5\},\{2,5\}$ 和三个最小割集 $\{1,2\},\{3,5\},\{4,5\}$.

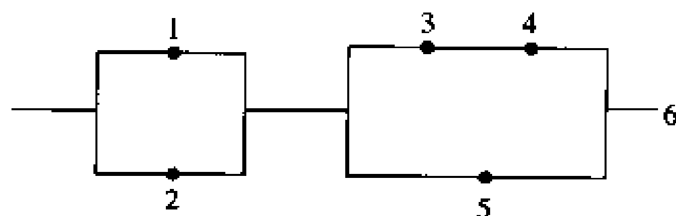


图 9-1

怎样计算单调系统的可靠度呢？设 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 是系统的结构函数，$p_i = P(x_i = 1)$（部件 i 的可靠度），$\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, \cdots, p_n)$，则系统的可靠度

$$R = P(\varphi(\boldsymbol{x}) = 1) = H(\boldsymbol{p}).$$

设系统的所有最小路集是 $B_1, B_2, \cdots, B_s$，$E_i = \{B_i$ 中所有部件正常$\}$（这是随机事件！），$i = 1, 2, \cdots, s$. 于是

$$H(\boldsymbol{p}) = P(\bigcup_{i=1}^{s} E_i) = \sum_{k=1}^{s}(-1)^{k-1} \sum_{1 \leqslant i_1 < \cdots < i_k \leqslant s} P(E_{i_1} \cap \cdots \cap E_{i_k}).$$

也可利用最小割集进行计算. 设系统的所有最小割集是 $C_1, C_2, \cdots, C_t$，$F_j = \{C_j$ 中所有部件失效$\}$，于是

$$\begin{aligned} 1 - H(\boldsymbol{p}) &= P(\bigcup_{j=1}^{t} F_j) \\ &= \sum_{k=1}^{t}(-1)^{k-1} \sum_{1 \leqslant i_1 < \cdots < i_k \leqslant t} P(F_{i_1} \cap \cdots \cap F_{i_k}). \end{aligned}$$

由此可求出 $H(\boldsymbol{p})$.

对复杂系统进行可靠性分析时，常常要寻找造成某个不希望的事件（如系统失效）发生的各种可能原因. 这个不希望发生的事件一般叫做**顶端事件**，以 T 来表示，导致顶端事件发生的各种直接原因称为次级事件. 对每个次级事件再进行类似的分解，找到更次一级的事件，一直到不能再分解为止，这些不能再分解的事件叫做基本事件. 这样，顶端事件和各级事件（包括基本事件）构成"树状"的逻辑关系：顶端事件是树的"根"，基本事件是树的"叶"，中间各级事件是树的"枝". 这样的逻辑关系形象地称为失效树（或故障树）. 对于失效树已有一套行之有效的分析方法，叫做失效树分析（或故障树分析），见文献[7].

9.4 网络系统

网络系统（简称网络）是由一些节点 $V_1, V_2, \cdots, V_r$ 及连接节点间的弧（或叫做边）$e_1, e_2, \cdots, e_l$ 共同组成. 这里每个 e_k 有一对节点 V_i, V_j 与其对应（e_k 是连接 V_i 与 V_j 的弧）. 节点和弧（通称为网络的单元）均有正常和失效（或故障）两种可能的状态. 假设各单元失效与否是相互独立的. 令 $n = r + l$，称节点 V_i 与 V_k 是连通的，若存在节点 $V_{i_1}, V_{i_2}, \cdots, V_{i_s}$ 使得分别有弧连接 V_i 与 V_{i_1}，V_{i_1} 与 V_{i_2}，$\cdots$，V_{i_s} 与 V_k. 若这些弧和这些节点 $V_{i_1}, V_{i_2}, \cdots, V_{i_s}$ 都处于正常状态，则称 V_i 与 V_k 是有效连通的.

用 $R_i(t)$ 表示第 i 个单元在时刻 t 正常的概率(单元的可靠度), $i = 1,2,\cdots,n$, 其中 $R_1(t), R_2(t), \cdots, R_r(t)$ 是 r 个节点的可靠度; $R_{r+1}(t), R_{r+2}(t), \cdots, R_n(t)$ 是 l 条弧的可靠度.

网络系统要研究的基本问题是:设 K 是指定的 k 个节点组成的集合($2 \leqslant k \leqslant r$),求出概率

$$R_K(t) = P(\text{在时刻 } t, K \text{ 中所有节点彼此有效连通}).$$

这就是所谓 K 终端问题. 当 K 只含两个节点时,就是最基本的两终端问题. 若 K 由网络的全部节点组成,则是全终端问题. 这些问题已有一些研究成果,但离完全解决还有很大距离.

10　系统可靠性的统计评定方法

10.1　成败型数据情形下的系统可靠度

设系统由 m 个单元组成,第 i 个单元的可靠度是 R_i, $R_i = R_i(t_0)$, t_0 是任务时间, $i = 1,2,\cdots,m$,系统的可靠度 $R = H(R_1, R_2, \cdots, R_m)$,这里 H 是已知函数. 设第 i 单元试验了 n_i 次,成功了 s_i 次,失败了 f_i 次($n_i = s_i + f_i$), $i = 1,2,\cdots,m$. 令

$$\boldsymbol{Z} = (s_1, s_2, \cdots, s_m) \qquad (\text{数据向量}),$$

$$\boldsymbol{\theta} = (R_1, R_2, \cdots, R_m) \qquad (\text{参数向量}).$$

假定各单元的试验是相互独立的,故 $\boldsymbol{Z}$ 的概率分布依赖于 $\boldsymbol{\theta}$. 令

$$P_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{Z} = (i_1, i_2, \cdots, i_m)) = \prod_{k=1}^{m} \binom{n_k}{i_k} R_k^{i_k} (1 - R_k)^{n_k - i_k}.$$

$P_{\boldsymbol{\theta}}(A)$ 表示参数真值是 $\boldsymbol{\theta}$ 时事件 A 的概率.

将 $\boldsymbol{Z}$ 的所有可能值用某种次序排成一列:

$$z_1 \geqslant z_2 \geqslant \cdots \geqslant z_l \qquad (\geqslant \text{表示次序关系}),$$

其中 $l = (n_1 + 1)(n_2 + 1)\cdots(n_m + 1)$. 令

$$G(z, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{z_k \geqslant z} P_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{Z} = z_k).$$

给定 $0 < \alpha < 1$,令

$$R_L(z) = \inf\{H(\boldsymbol{\theta}) : G(z, \boldsymbol{\theta}) > \alpha\}, \tag{10-1}$$

则 $R_L(\boldsymbol{Z})$ 是 $R = H(\boldsymbol{\theta})$ 的 $1 - \alpha$ 水平置信下限[1].

这是最一般的方法,所得的置信下限的值依赖于对 $\boldsymbol{Z}$ 的值如何排序. 选择合适的排序法是关键问题. 对于各种不同结构的系统,不能给出统一的优良的排序法.

下面以最基本的系统——串联系统为例来说明. 此时 $R = H(R_1, R_2, \cdots, R_m) = \prod_{i=1}^{m} R_i$,基于 $\boldsymbol{Z} = (s_1, s_2, \cdots, s_m)$,得到 R 的最大似然估计

$$\hat{R}=\prod_{i=1}^{m}\frac{s_i}{n_i},$$

可按 $\hat{R}$的大小将 Z 的所有可能值进行排序：若 $z=(s_1,s_2,\cdots,s_m)$，$\hat{z}=(\tilde{s}_1,\tilde{s}_2,\cdots,\tilde{s}_m)$，则当且仅当

$$\prod_{i=1}^{m}\frac{s_i}{n_i}\geqslant\prod_{i=1}^{n}\frac{\hat{s}_i}{n_i}$$

时将 z 排在 $\hat{z}$的“前面”(记作 $z\geqslant\hat{z}$). 这个排序法是温特博特姆(Winterbottom)1974 年正式提出的.

根据式(10-1)计算 R_L，一般是相当复杂的，为此，只好去找近似的置信下限. 最流行的近似方法是 L-M 法(林斯特龙(Lindstrom)和马登斯(Maddens)提出的)，其基本内容是：

令

$$n_*=\min(n_1,n_2,\cdots,n_m),$$

$$s_*=n_*\prod_{i=1}^{m}\frac{s_i}{n_i}.$$

设想整个系统进行了 n_* 次试验，共出现了 s_* 次成功(n_* 是虚拟试验次数，s_* 是虚拟成功次数)，则系统可靠度 R 的 $1-\alpha$ 水平(近似)置信下限为

$$R_{LM}=R_{LM}^{(1)}+(s_*-[s_*])R_{LM}^{(2)},$$

其中

$$R_{LM}^{(1)}=\left(1+\frac{n_*-[s_*]+1}{[s_*]}F_{1-\alpha}(2(n_*-[s_*]+1),2[s_*])\right)^{-1};$$

$$R_{LM}^{(2)}=\left(1+\frac{n_*-[s_*]}{[s_*]+1}F_{1-\alpha}(2(n_*-[s_*]),2([s_*]+1))\right)^{-1},$$

式中 $[s_*]$ 是不超过 s_* 的最大整数；$F_{1-\alpha}(k,l)$ 是第 1 自由度为 k，第 2 自由度为 l 的 F 分布的 $1-\alpha$ 分位数.

值得指出的是，对于无失败情形(即 $s_1=n_1,s_2=n_2,\cdots,s_m=n_m$)，可从式(10-1)直接求出 R 的 $1-\alpha$ 水平置信下限为 α^{1/n_*}.

10.2 单元寿命为指数分布时串联系统的可靠度

设系统由 m 个单元串联而成，第 j 个单元的寿命服从失效率为 λ_j 的指数分布 $(j=1,2,\cdots,m)$，λ_j 均未知. 对于给定的 t_0(任务时间)，第 j 个单元的可靠度是

$$R_j=\exp(-\lambda_j t_0),\qquad (j=1,2,\cdots,m).$$

可根据各单元的试验数据找出系统可靠度 $R=\prod_{j=1}^{m}R_j$ 的置信下限. 下面分两种情形介绍求 R 置信下限的方法.

10.2.1 有替换定时截尾情形

设各单元分别进行有替换定(总)时截尾寿命试验.第 j 个单元的试验总时间是 t_j,共有 τ_j 次替换,$j=1,2,\cdots,m$.此时,要计算出可靠度 R 的精确置信下限相当困难.可用下列方法给出近似的置信下限.

把各单元的数据 $\{(t_j,\tau_j),j=1,2,\cdots,m\}$ 折合成整个系统的虚拟试验数据 (t^*,τ):试验到 t^* 截止,累计失效数为 τ.

t^* 和 τ 的计算公式分别为

$$t^*=\frac{-t_0(\hat{R})^2\ln\hat{R}}{D},$$

$$\tau=-\frac{t^*}{t_0}\ln\hat{R},$$

其中

$$\hat{R}=\exp\{-\sum_{j=1}^{m}\frac{\tau_j}{t_j}t_0\},$$

$$D=(\hat{R})^2t_0^2\sum_{j=1}^{m}\frac{\tau_j}{t_j^2}.$$

注意,τ 不一定是整数,可用最近的整数替代.既然设想整个系统进行了有替换的寿命试验,数据是 (t^*,τ),根据第3章可知,系统可靠度 R 的 $1-\alpha$ 水平近似置信下限为

$$R_L=\exp\left(-\frac{t_0}{2t^*}\chi^2_{1-\alpha}(2\tau+2)\right),$$

其中 $\chi^2_{1-\alpha}(l)$ 是 l 个自由度 χ^2 分布的 $1-\alpha$ 分位数.

10.2.2 无替换定数截尾情形

设对第 j 个单元任取 n_j 个同型试验件(寿命都服从参数是 λ_j 的指数分布)同时进行寿命试验,试验进行到出现第 r_j 个失效停止.r_j 是预先指定的整数,$1\leqslant r_j\leqslant n_j$.

设 $t_{j1}\leqslant t_{j2}\leqslant\cdots\leqslant t_{jr_j}$ 是各次失效的时刻.令

$$Z_j=\sum_{i=1}^{r_j}t_{ji}+(n_j-r_j)t_{jr_j},$$

这是第 j 单元各试验件试验时间之和.有了数据 $\{(Z_j,r_j):j=1,2,\cdots,m\}$,就可以计算系统可靠度的置信下限,但比较复杂.下述方法给出了系统可靠度的近似置信下限.

设
$$Z_{(1)}=\min(Z_1,Z_2,\cdots,Z_m),$$

$$l=\sum_{j=1}^{m}\frac{r_j-1}{Z_{(j)}}+\frac{1}{Z_{(1)}},\quad V=\sum_{j=1}^{m}\frac{r_j-1}{Z_j^2}+\frac{1}{Z_{(1)}^2},$$

则系统可靠度 $R(t_0)$ 的 $1-\alpha$ 水平近似置信下限为

$$R_L(t_0) = \exp\left(-l\left(1-\frac{V}{9l^2}+\frac{z_{1-\alpha}\sqrt{V}}{3l}\right)^3 t_0\right),$$

其中 $z_{1-\alpha}$ 是标准正态分布的 $1-\alpha$ 分位数.

上述方法在工程上叫做 A.O.法(近似最优法),是20世纪70年代提出来的.

10.3 树形系统的可靠度

在实际工作中,一个系统常分成若干个子系统,每个子系统又分成若干个子子系统,子子系统还可再分下去…… 总之,整个系统形成倒置树状,例如,在图 10-1 中,系统 A_1 分成了系统 A_{11} 和 A_{12},A_{11} 又分成 A_{111} 和 A_{112},A_{12} 只以 A_{121} 为唯一的子系统,A_{112} 又分为 A_{1121} 和 A_{1122}.

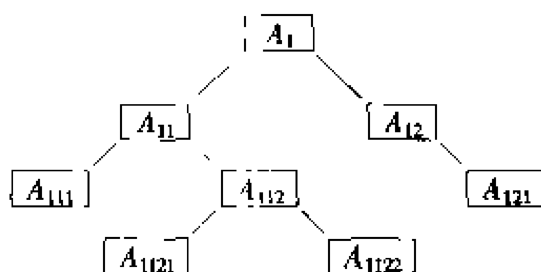


图 10-1

这种系统称为**树形系统**. 一般用符号 $\mathscr{S}=\{A_m:m\in M\}$ 表示,这里 M 是一些由正整数组成的有限序列构成的有限集合,满足下列三个条件:

1° $1\in M$;

2° 若 $i_1i_2\cdots i_l\in M$,则 $i_1=1$;

3° 若 $i_1i_2\cdots i_l\in M(l\geqslant 2)$,则 $i_1i_2\cdots i_{l-1}\in M$,且对于一切 $k=1,2,\cdots,i_l-1$,有 $i_1i_2\cdots i_{l-1}k\in M$.

称 $A_{\tilde m}$ 是 A_m 的子系统,若 $m=i_1i_2\cdots i_k$,$\tilde m=i_1\cdots i_k i_{k+1}\cdots i_l(l>k)$. 此时,若 $l=k+1$,则称 $A_{\tilde m}$ 是 A_m 的第一代子系统. 称 A_m 是末代子系统,若它没有子系统. 令

$$M_0=\{m:m\in M,\text{且 } A_m \text{ 是末代子系统}\},$$

$$M(m)=\{\tilde m:A_{\tilde m}\text{ 是 } A_m \text{ 的第一代子系统}\}.$$

设 R_m 是 A_m 的可靠度,即 R_m 是 A_m 在任务时间内正常工作的概率. 假定:若 $m\,\overline{\in}\,M_0$ 且 $M(m)=\{m_1,m_2,\cdots,m_l\}$,则 $R_m=g_m(R_{m_1},R_{m_2},\cdots,R_{m_l})$,而且 g_m 是已知函数,对各变元有连续偏导数.

若对于每个 $m\in M$,对 A_m 有试验数据 (n_m,s_m)(试验了 n_m 次,成功了 s_m 次),怎样找出整个系统 A_1 的可靠度的置信下限呢?精确解很难求出. 郑忠国提出了下列虚拟系统法,可以计算出近似的置信下限 R_L.

该法是递归地定义出 $\widehat N_m$ 和 $\widehat s_m$. 令

$$\widehat N_m=\begin{cases} n_m & (\text{当 } m\in M_0 \text{ 时}),\\ n_m+\widehat n_m & (\text{当 } m\,\overline{\in}\,M_0 \text{ 时});\end{cases} \tag{10-2}$$

$$\hat{n}_m = \frac{\hat{R}_m(1-\hat{R}_m)}{\sum\limits_{\tilde{m} \in M(m)} \frac{\hat{R}_{\tilde{m}}(1-\hat{R}_{\tilde{m}})}{\hat{N}_{\tilde{m}}}\left(\frac{\partial \hat{R}_m}{\partial R_{\tilde{m}}}\right)^2} \quad (m \overline{\in} M_0); \tag{10-3}$$

$$\hat{R}_m = \begin{cases} \dfrac{s_m}{n_m} & (m \in M_0), \\ g_m\left(\dfrac{\hat{s}_{\tilde{m}_1}}{\hat{N}_{\tilde{m}_1}}, \cdots, \dfrac{\hat{s}_{\tilde{m}_l}}{\hat{N}_{\tilde{m}_l}}\right) & (m \overline{\in} M_0); \end{cases} \tag{10-4}$$

$$\hat{s}_m = \begin{cases} s_m & (m \in M_0), \\ s_m + \hat{n}_m \hat{R}_m & (m \overline{\in} M_0). \end{cases} \tag{10-5}$$

在式(10-3)、式(10-4)中，$M(m) = \{\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \cdots, \tilde{m}_l\}$，$\frac{\partial \hat{R}_m}{\partial R_{\tilde{m}}}$ 表示偏导数 $\frac{\partial g_m}{\partial R_{\tilde{m}}}$ 在 $\hat{R}_{\tilde{m}}$ $(\tilde{m} \in M(m))$ 处的值(注意 $R_m = g_m(R_{\tilde{m}_1}, R_{\tilde{m}_2}, \cdots, R_{\tilde{m}_l})$).

实际计算时，首先计算末代子系统的 $\hat{N}_m$ 和 $\hat{s}_m (m \in M_0)$，再计算倒数第二代子系统的 $\hat{N}_m$ 和 $\hat{s}_m$，然后再计算倒数第三代子系统的 $\hat{N}_m$ 和 $\hat{s}_m$，…，直到计算出 $\hat{N}_1$ 和 $\hat{s}_1$ 为止. 令

$$N = \hat{N}_1, \quad s = \hat{s}_1.$$

当 N 和 s 都是整数时，R_L 是方程

$$\sum_{i=s}^{N} \binom{N}{i} R_L^i (1-R_L)^{N-i} = \alpha$$

的根；当 N 和 s 不全是整数时，规定 R_L 是方程

$$\frac{\int_0^{R_L} t^{s-1}(1-t)^{N-s} dt}{\int_0^1 t^{s-1}(1-t)^{N-s} dt} = \alpha$$

的根.

这样得到的 R_L 就是系统(即 A_1)可靠度 R(即 R_1)的 $1-\alpha$ 水平(近似)置信下限①.

参 考 文 献

1　陈家鼎著. 生存分析与可靠性引论. 合肥：安徽教育出版社，1993.

---

① Zheng Zhongguo. Virtual system for system tree. Tech Rep Peking University, 1992.

2 曹晋华,程侃.可靠性数学引论.北京:科学出版社,1986.
3 Cox D R,Okaes D. Analysis of survival data. New York:Chapman and Hall,1984.
4 (美)Elisa T Lee.生存数据分析的统计方法.陈家鼎,戴中维译.北京:中国统计出版社,1998.
5 (美)Lawless J F.寿命数据中的统计模型与方法.茆诗松,濮晓龙,刘忠译.北京:中国统计出版社,1998.
6 陈家鼎著.序贯分析.北京:北京大学出版社,1995.
7 何国伟著.可信性工程.北京:中国标准出版社,1997.
8 周源泉,翁朝曦.可靠性评定.北京:科学出版社,1990.

·随机数学卷·

第19篇

决策分析

编　者　谢志刚
审校者　成世学

目　录

引　言

决策分析研究在有风险和不确定因素的环境下，一个决策者应该怎样分析他所面临的问题，并作出合理的抉择？在决策分析的过程中，不仅需要用随机数学工具对决策问题中客观存在的各种不确定因素进行定量的描述和分析，还需要对决策者本身的价值结构（又称为偏好）等主观因素进行定量的描述，因而，在形式上决策分析方法不再是纯粹或“客观”的数学分析方法．作为一套理论，决策分析的主要功能是提供一套规范的理性思维方法，而不是建立一个完整的定量模型来代替人们作出正确的决策．

圣彼德堡悖论是决策分析发展史上第一个有名的决策例子，它导致了丹尼尔·伯努利（D. Bernoulli）在 1738 年提出了效用和期望效用的概念和原理．1944 年冯·诺伊曼和摩根斯顿（Von Neumann & Morgenstern）在他们的名著 The Theory of Games and Economic Behavior 一书中为期望效用原理建立了严格的逻辑基础．决策分析中所指的经典效用理论通常是指冯·诺伊曼和摩根斯顿的效用理论，并常常被称为线性效用理论．1931 年拉姆齐（F. P. Ramsey）从合理决策的角度，最先讨论了主观概率．1937 年德·芬尼逖（De Finetti）对主观概率的结构作出过重要贡献．1954 年，萨凡奇（L. Savage）在 The Foundations of Statistics 一书中把效用和主观概率这两条线结合起来，把它们统一在同一组合理行为假设下，为统计决策理论建立了严格的公理基础，这标志着决策分析的理论基础已经初步完备．因此，萨凡奇被认为是期望效用理论的主要奠基人之一，决策分析中提到的主观期望效用理论通常都是指萨凡奇建立的这套统一的理论．但是，决策理论界一直没有停止过对这套理论的质疑和批评，通常以悖论的形式提出来．这对于经典的效用理论产生了很大的冲击和挑战，但同时不断地有一些新的理论提出来，作为对经典理论的补充和发展．这些新理论通常被称为非线性效用理论，斐什伯恩（Fishburn，1988）在 Nonlinear Preference and Utility Theory 一书中总结了 1988 年以前的各种非线性效用理论．

自 20 世纪 60 年代初决策分析方法被用于石油和天然气的钻探决策问题以来，决策分析已经在投资、新产品开发、项目引进，以及医疗、能源、环境等大量领域中获得了广泛的应用．由于保密的原因，许多应用实例没有公开或没有介绍出完整的决策程序，但仅从已经公布的文献中就可以看出其应用成就和前景．从文献[11]可以查找到 1970 年以前有关决策分析应用范例的线索，文献[4]汇集了 1970—1989 年间发表在各种英文版杂志上的诸多应用成果．

本篇将概述决策分析的基本过程，包括如何表达一个决策问题，如何描述外在的不确定因素，如何描述决策者的主观价值，以及建立评价策略的标准．

1 概　　论

1.1 决策问题的表达

1.1.1 决策问题表达的三个基本元素

自然状态、策略和后果是表达一个决策问题的三个基本元素.自然状态是指决策者在所面临的决策问题中无法预知或无法控制的不确定因素所经历的状态.例如,要决定是否开发一种新产品投入市场时,市场对该产品的需求量是无法控制的不确定变量,可以把市场需求量简单地归结为“需求量大”、“需求量一般”和“需求量小”三个状态,也可以归结为从零到无穷大之间的任何一个量.又如,在保险决策问题中,保险公司作为决策者所关心的在保险期内究竟会有多少次索赔发生,以及每次索赔的额度多大等,这都是不确定的变量.每一种可能出现的情况都可以称之为一个状态,自然状态的全体称为状态空间.和概率论中样本空间一样,对于所考虑的不确定因素而言,假定有且仅有一个状态会出现.状态空间的子集称为事件,事件发生是指事件中的一个状态出现.一种状态是否出现独立于决策者的意志,不依赖于决策者的选择.

由于决策者面临着众多的不确定因素,因此,为达到决策目标而可以选择的方案(策略、行动)也不是唯一的.所有可供选择的方案全体称为策略空间.决策即是从策略空间中选出一个“最优”方案.

决策者在采取了一项策略后,无论哪种状态出现,都必然会导致某一后果.所有可能产生的后果全体叫做后果空间.由于决策者不能预知哪个状态会出现,因而,无法预知究竟哪个后果会出现.但决策分析假定决策者能够分辨,当某状态发生时选择某项策略将会产生什么样的后果.

一个旅行者采到一些蘑菇,由于不知是否有毒,无法决定是吃掉还是扔掉这些蘑菇.对于这个简单问题,上述的状态空间、策略空间和后果空间可以分别表示为:

$$状态空间=\{蘑菇无毒,蘑菇有毒\};$$
$$策略空间=\{吃掉蘑菇,扔掉蘑菇\};$$
$$后果空间=\{美餐一顿,美餐一顿后中毒,没吃也没中毒\}.$$

1.1.2 决策问题的三种表达方式

决策理论对决策问题表达的通常做法是,把状态和后果作为两个基本元素,而把策略作为一种功能作用定义为从状态空间到后果空间的一个映射.记 S 为状态空间,X 为后果空间,则映射 $f:S\to X$ 是一项策略,$F=\{f:S\to X\}$ 就是策略空间.如上例中,记

$$S=\{s_1,s_2\}=\{蘑菇无毒,蘑菇有毒\},$$
$$F=\{f,g\}=\{吃掉蘑菇,扔掉蘑菇\},$$

则 $f(s_1)=$ 美餐一顿,

$f(s_2)=$ 美餐一顿后中毒,

$g(s_1)=g(s_2)=$ 没吃也没中毒,

即 $X=\{f(s_1),f(s_2),g(s_1)\}$.

决策问题的三种表达方式是:

(1) 决策表 在只考虑有限种状态的情况下,为了直观地表达一个决策问题的结构,通常把状态、策略和后果这三个基本概念列成一个表格形式,称之为**决策表**(见表 1-1).从表中可以看到,自然状态 s 是决策者无法控制的外在不确定因素,但可以想象并列举出各种可能情况;策略 f 则是决策者自己控制的行为;f 与 s 结合便对应着某种后果 x,因此,决策表清楚地表达了状态、策略和后果之间的逻辑关系.

表 1-1

策略	自然状态			
	s_1	s_2	…	s_n
	后果			
f_1	x_{11}	x_{12}	…	x_{1n}
…	…		…	
f_m	x_{m1}	x_{m2}	…	x_{mn}

(2) 决策树 决策问题的另一种表达方式是将方案、状态和后果用一株树来表示,形象地称之为**决策树**,如图 1-1 所示.在图 1-1 中,方块叫做决策点;由决策点画出的若干条线(每条线代表一个方案),叫做方案枝;方案枝末端的小圆圈,叫做状态点;从状态点引出的线条代表不同的状态,叫做概率枝;在概率枝末端的小三角△,叫做后果点,在后果点后面列入对应的后果.

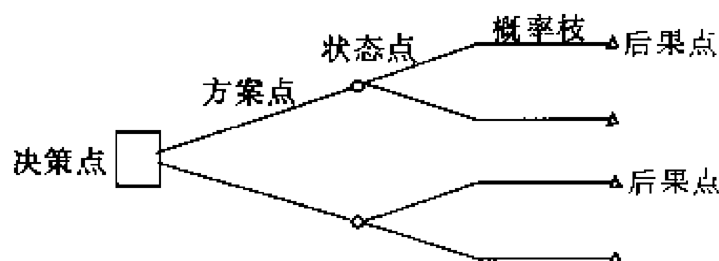


图 1-1

用决策树作决策的过程可以形象地看作一个从右向左逐步后退的修枝过程,最后在决策点留下一条树枝,即为最优方案.

(3) 决策影响图 **决策影响图**是近些年发展起来的一种更为灵活、实用的表达和分析方法.如图 1-2 所示,在决策影响图中,常用圆圈表示机会节点,用方块表示策略节点,用菱型表示后果节点,分别记作 $n(s)$, $n(d)$和 $n(c)$.决策影响图与决策表和决策树方法的不同之处在于,它不仅简单地表达了状态、策略和后果之间的逻辑关系,还能进一步表达状态与状态之间、策略与策略之间,以及它们相互之间的依赖关系.比如在机会节点之间,如果从机会节点 n_1 有一箭头指向机会节点 n_2,则称 n_2 为 n_1 的一个直接后继节点.这种依赖关系的直观表达方法,既为用条件概率分析不确定性的概率规律提供了直观性,也为现代计算机智能方法用于分析决策问题提供了直观指导作用.

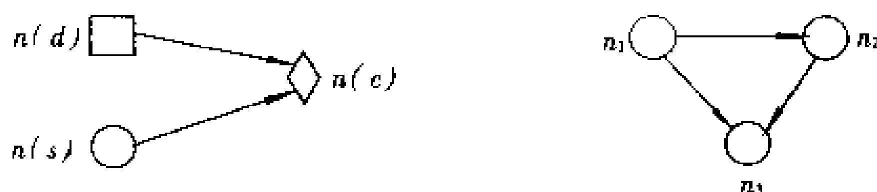


图1-2

1.1.3 表达效应

自然状态、决策后果和策略都可以被表达为不同形式,因而,对一个决策问题的表达也会有不同的方法.除决策表、决策树和决策影响图外,决策分析中用于表述一个决策问题的方法还有多种,但这些方法所面临的一个共同的基本的问题是:对同一个决策问题的不同表达是否会导致不同的决策?

例1 卡尼曼和特维斯克(Kahneman & Tversky,1979)对152名学生作试验,让他们想象在美国出现了某种传染病,且估计有600人传染上此种疾病.现有两个与此传染病作斗争的计划,让他们作出抉择:

计划 A:可以挽救200人的生命;

计划 B:有1/3的可能性可以挽救全部人的生命;有2/3的可能性计划失败,600人全部丧生.

试验结果有72%的学生认为应执行计划 A.同时,他们又对另一组具有相同背景的155名学生作试验,让他们就计划 C 和 D 作出选择:

计划 C:将导致400人丧生;

计划 D:有1/3的可能性可以挽救全部人的生命,有2/3的可能性无法挽救这600人的生命.

结果有78%的学生认为应该执行计划 D.

留心一看,计划 $A=$ 计划 C,计划 $B=$ 计划 D,其后果是一致的.然而,决策者的抉择又是如此地依赖于问题的表达方式,这种现象称之为**表达效应**.由此可见,决策分析作为一套如何指导人们进行合理决策的理论方法,一开始就遇到难题,这个问题至今仍是决策分析研究的热点问题之一.

决策分析作为一套规范的决策理论和方法,需要在一系列"合理性假设"下讨论问题,关于决策问题表达的假设是如下的不变原理.

不变原理:决策问题的不同表达应该不影响对策略的选择.

为了合理地选择策略,需要对状态和后果这两个不确定因素进行深人的定量分析.

1.1.4 主观概率

决策者要在不确定的环境下作出决策,就需要对所涉及到的不确定因素进行分析.比如在前面提到的保险决策问题,决策者需要对保险期内可能发生的索赔情况进行分析后,才能进行有理性的决策.但如何定量描述这些外在的不确定因素

呢？大家都同意用概率来研究自然和社会中的不确定现象，比如寻求索赔次数和索赔额的概率分布规律．但决策分析中采用的获得概率分布的方法更强调贝叶斯(T. Bayes)方法，而不是建立在样本信息基础上的传统方法，因为多数决策都是一次性的，或不能完全重复的，很少有大量的统计资料作为频率依据．按照这样的理解，一个事件发生的概率，可看作是决策者在他所掌握的信息条件下，根据自己的认识水平对该事件的发生所持的主观信任程度．这种概率称为**主观概率**或**个人概率**．

数学上可以用一个二元关系"$\succ$"来表达决策者对有关事件的信念，$s_i \succ s_j$ 表示状态 s_i 比 s_j 更可能出现．只要决策者的信念符合一定的准则，即对二元关系 $\succ$ 规定一组假设，比如，要求 $\succ$ 具有传递性、完备性等，就能从这组假设出发，推导出存在一个概率测度 P，使 $s_i \succ s_j$ 的充分必要条件为 $P(s_i) > P(s_j)$．多数情况下，P 仍然具有概率的非负性、可加性和规范性等性质．因此，主观概率的理论体系可以建立在上述二元关系表达的信念准则上．主观概率比数理统计学中的客观概率在解释上具有更宽的内涵，不仅可对能大量重复出现的随机事件定义概率，而且，对于任何不完全确知的事件也可以给予概率度量．

1.1.5 偏好与效用

在决策者获得决策问题中不确定因素的概率规律后，是不是就能作出正确的决策呢？问题并非如此．决策分析认为，获得对外在的各种不确定因素的正确把握，仅仅是解决问题的一个方面，尽管是一个十分重要的方面．仍以保险决策为例，对同一承保标的来说，当获得对其潜在损失的"公正"评估，即获得大家都认可的评估后，对于不同的保险人来说，仍可能会作出不同的定价决策、不同的风险准备金提留计划或不同的再保险安排等等．既然完全不同的决策都可以建立在对潜在损失的共同认可的评估基础之上，那么对外在不确定因素的把握确实只是问题的一个方面．以下用一个著名的赌博例子来进一步说明这一点．

例2（圣彼得堡悖论） 传说古代在圣彼得堡街头流行着一种赌博，规则是由参加者先付一定数目的钱，比如一百卢布，然后掷分币．当第一次出现人像面朝上时，一局赌博便终止；如果掷到第 n 次才出现人像面朝上，那么参加者可收回 2^n 个卢布，$n=1,2,3,\cdots$ 决策人面临的问题是究竟参不参加赌博？

假定分币的形状是均匀的，则第 n 次投掷才出现人像面朝上的概率为

$$P(n)=2^{-n},$$

相应的回报值为

$$V=2^n-100 \qquad (n=1,2,3,\cdots),$$

因此，"参加赌"所对应的平均回报，即金额期望值为

$$EV=\sum_{n=1}^{\infty}(2^n-100)2^{-n}=+\infty,$$

而"不参加赌"所对应的平均回报显然为 0．照此看来，似乎只要花 100 卢布来赌，就可以赢得（平均来说）"无穷多卢布"，参加赌是绝对合算的．可是实际情况与此相反，总是掷不了几次就结束，极少出现能收回 100 卢布以上的情况．这种现象称为

圣彼得堡悖论.

在这个例子中,对概率的评估肯定没有问题,对平均回报即期望值的计算更不会错,而且"参加赌"对应的期望值与庄家所要求的赌注无关,无论押多大的赌注平均回报都是正的无穷大,绝对合算.但问题究竟出在哪里呢?

决策分析认为,要作出合理的决策,还需要对决策者本身的价值或偏好结构进行分析,因为不同的决策者可能对同一事物的好坏、价值大小的看法不一样,只有知道了决策者本人的偏好之后,才能作出对他来说是最好的决策.

偏好是指决策者衡量策略和后果优劣的价值观.同样可用一个二元关系来描述偏好,称为偏好关系.决策过程的逻辑顺序可以看作是决策者通过比较对决策后果的偏好关系以及对状态发生的信念关系,来推导出对策略的偏好关系.

偏好是对决策者价值结构的一种定性描述,若要对其进行定量的刻画,则需要用效用函数作为工具.

定义1　设 D 是一个非空集,$\succ$ 是 D 上的一个序关系,若在 D 上的实函数 u 满足

$$x \succ y \Leftrightarrow u(x) > u(y) \qquad (\forall x, y \in D), \tag{1-1}$$

则称 u 为 D 上的**效用函数**.

如果 D 是策略空间,u 就是关于策略的效用函数,但策略空间上的效用函数习惯用大写字母 U 表示;如果 D 是后果空间,u 就是关于后果的效用函数,习惯用小写字母 u 表示.效用函数不仅能定性地反映决策者对于策略或后果间的偏好关系,而且还能定量地刻画偏好的相对强度.

在决策分析中,效用和概率构成了对决策问题进行定量分析的两个基本方面.

1.1.6　效用和期望效用原理

效用函数的概念是丹尼尔·伯努利为解决圣彼得堡悖论在1738年提出来的.其实,圣彼得堡赌博问题并非一个实际的赌博问题,而是丹尼尔的表兄尼古拉·伯努利(N. Bernoulli)故意设计的一个悖论,其目的就是要说明,获得对概率的把握只是作出决策的一个方面,尤其是为了挑战流行的以最大金额期望值(即最大平均回报或最小平均损失)作为决策的标准的观点.这个悖论提出后,许多学者都试图解决它,其中以丹尼尔·伯努利对这个问题的解答最为著名.他的解答发表在他1738年的论文里,包含了边际效用递减原理和最大期望效用原理这两条著名的原理,这两条相关的原理至今仍是经济学中最基本的原理.

1.边际效用递减原理

个人对商品和财富所追求的满足程度由相对于他的主观价值——效用值来衡量,商品和财富的效用值随着其绝对数量(或者货币单位量)的增加而增加,但增加的速度则随着绝对数量的增加而逐渐递减.这个结论称为**边际效用递减原理**.

如果用 x 来代表一件商品或者一定数目的金额值,那么这件商品或这笔钱对某个人所产生的满足程度或者说它对于这个人的主观价值就称为 x 的效用,完整地说,x 是相对于这个人的效用,记作 $u(x)$.边际效用递减原理包含两层含义:其一是说人对于财富和商品的占有是多多益善的,即 $u(x)$ 是一个增函数,一阶导数

$u'(x)>0$;其二是说随着财富或商品数额的不断增加,所获得的满足程度虽然也在增加,但增加的速度却在不断下降,即 $u(x)$是一个上凸函数,二阶导数 $u''(x)<0$. 图 1-3 所示的是一条典型的效用函数曲线.

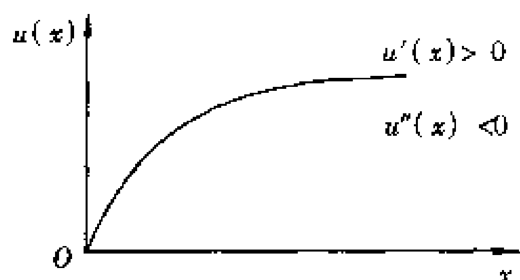


图 1-3

2. 最大期望效用原理

在具有风险和不确定条件下,个人的行为动机和准则是获得最大期望效用值而不是获得最大期望金额值. 这个结论称为**最大期望效用原理**.

最大期望效用原理可以看作是,在决策者获得了对外在不确定因素的概率分布规律,以及对其自身偏好结构即效用函数的评估后,把这两个因素进行综合起来作为评价策略优劣标准的原则. 数学上可如下定义期望效用.

定义 2　设 S, X 和 F 分别代表状态空间. 后果空间和策略空间, u 是 X 的效用函数, p 是 S 上的概率测度,则对于策略 f,称

$$EU(f)=\int_S u(f(s))\mathrm{d}p \tag{1-2}$$

为策略 f 的**期望效用**. 它又可看作是 F 上的效用函数 U.

随着状态空间 S 的空间结构及概率测度含义的不同,期望效用表达式式(1-2)中的积分含义也不同. 比如当 S 为有限和离散空间时,积分退化为普通求和.

1.2　决策分析方法

决策分析是一个十分复杂的过程,静态地看,决策分析的原理是以数学为基本工具,从一个决策者的角度出发去描述和分析:

(1) 外在环境中客观存在的、与决策问题相关的各种不确定因素;

(2) 决策者本身的主观价值或偏好结构,包括风险态度等内在因素;

(3)把以上二者进行综合以建立一个评价策略优劣的原则或标准.

但作为定量分析的前提,必须恰当地表达一个决策问题,在一个固定的模型框架下,对组成决策问题的各基本组成元素分别进行定量刻画,并综合对这些基本元素的分析,进而建立判别策略优劣的标准. 具体地看,决策分析实际上是一个动态的分析过程,在各个环节中,需要不断地用所获得的新信息来更新原来的判断. 此外,有些判断可能对最终结果的影响非常灵敏,因而有必要作灵敏度分析.

1.2.1　决策分析的步骤

为了强调其基本原理,可以把决策分析过程简单地分解为:形成决策问题、度量主观概率、评价决策后果的效用以及通过计算期望效用比较策略优劣这四个基本步骤,如图 1-4 所示.

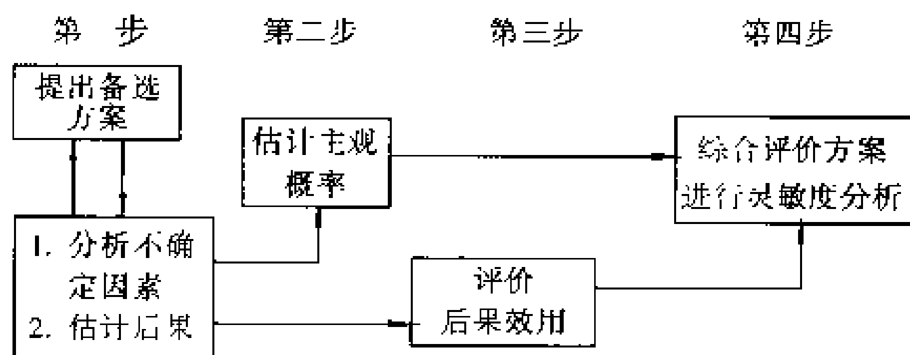


图 1-4

1. 形成决策问题

在决策分析的各个环节中,形成决策问题既是决策过程中最为困难也是最值得努力的工作.其困难的主要原因在于决策环境的复杂性.当决策者面临一个决策问题时,他要根据自己的决策目标而提出一系列行动方案,而能够多找出一个行动方案对于问题的解决可能是很关键的.这是一件创造性的工作.遗憾的是,决策者往往不知道究竟有哪些方案可供选择,即使列举了一系列的行动方案,也难以弄清楚每项方案将产生哪些后果.

决策环境是指影响决策过程的有关因素全体.随着社会和生产的日益发展,人们面临的决策环境比以往任何时候都更为复杂.归纳起来,下列几点尤为突出.

(1) 多目标性　决策的目的是使某个目标达到最优.然而,所面临的现实是,要求一项决策必须同时满足多项目标,这些目标之间通常还是相互联系,甚至是相互冲突的.比如考虑一项兴修水利工程的决策问题,要求达到的目标可能有获得最大经济效益、对生态平衡和自然环境的破坏程度最小、对交通和有关居民的不利影响最小,以及尽可能减少投资成本等等.这样一来,所形成的后果空间是多维的,结构通常很复杂,更难以平衡各后果之间的冲突和分辨出对它们的偏好并赋予效用值.决策分析的重要分支——多目标决策将专门处理这个矛盾.

(2) 模糊性　决策环境的不确定性不仅表现在对未来状态无法预知的随机性方面,而且表现在形成决策问题的整个过程中和对状态、后果及策略的归纳以及对效用值和主观概率的估计过程中,都存在着大量的模糊处理问题.例如,在上文中曾提到的开发新产品投入市场的决策问题,通常把市场需求量归结为"大"、"中"、"小"等几个简单状态,也可以归结为 $S=(0,+\infty)$.其实,"大"、"中"、"小"是 $S=(0,+\infty)$上的三个模糊子集.同样,对后果及方案的归结也常常是模糊的.决策分析的另一个分支——模糊决策使决策过程在定量分析中更加精确化.

(3) 决策过程的连贯性　决策过程往往是一个多阶段或连贯的过程,作一次选择并不能立即达到决策目标,只能获得一定的效应和给决策者提供一些关于未

来状态的信息.决策者在收集了这些新信息,预测下次可能出现的状态后,再作决策.如此一步一步地进行下去,直至达到决策目标为止.这样的问题需要用序贯决策方法,特别是,当系统状态的转移规律与系统以前的历史无关时.马尔可夫决策方法适用于解决此类问题.

(4) 多人决策 通常说的决策分析都假定只有一个决策者,主观概率、偏好和效用函数是相对于该决策者而言的.但是,在一些大型决策问题中,参与决策的决策者往往是由多人,甚至是由代表不同利益的人所组成的一个集体,他们之间的偏好各不相同.在这种情况下,什么是最优?对谁最优?近些年来,已经发展出了群体决策理论来解决这种问题.对于有相互竞争的情况,则有对策论或博弈论作为专门的理论方法来解决这类问题.

此外,决策过程的周期长、决策后果风险大、决策者难于表达自己的真实偏好,以及决策者的认识水平不全面等因素都是决策分析所面临的难于解决的因素.这些因素互相交织在一起,没有一种全能的办法能解决决策所面临的全部问题.本篇介绍的决策分析只是从一个决策者的角度,对在风险和不确定条件下作出合理决策,提供一种基本原理和逻辑思考方法.

2. 估计主观概率

决策问题形成后,决策者所致力的问题就是对自然状态和决策后果这对不确定因素进行定量分析.在对不确定性进行概率评估方面,已经发展出了一系列评估技术,并已有了许多理论和方法,在下一节将作专门介绍.

3. 评价后果的效用值

除了估计主观概率外,还必须对各种后果,尤其是对不能用金额值表达的非数量化后果估计出效用值,用它作为决策者的价值尺度,去衡量每一个决策后果.评定效用函数的常用方法是 standard gamble technique 方法[3],其基本思想是评价决策者对于各种抽奖的**确定当量**(certainty equivalent).例如,决策者如果认为一个以50%机会获得100美元和50%机会损失10美元的抽奖与稳拿20美元没有差别,则这20美元就是决策者对于该抽奖的确定当量.可用后果构造出一系列抽奖,然后通过评价确定当量来得到决策者的效用曲线.也可以利用经济学中关于边际效用的递减原理,用对数函数或其他较简单的函数来近似决策者的效用函数.不过,要真实、准确地评价一个决策者的效用函数不是一件容易的事,这常常是引起争议的焦点之一,有关这方面的研究还在进行着,在第3章将介绍和讨论这一专门问题.

4. 评价最优策略

决策者一旦对主观概率和效用给出了定量估计,就可以通过计算策略的期望效用值来比较对策略的偏好,从而采取最优策略.现在已经发展了许多不同的期望效用模型,究竟选择哪个模型作为最优策略的评价标准,则依赖于决策者对自己的真实偏好所能提供的信息.期望效用原理只是要帮助决策者定量地分析自己的理性,它的特点是:只要你想把你对策略的偏好与预先规定的合理行为假设保持一致,并且愿意规定对后果这个更为基本的决策元素的偏好,你就选择这组行为公理所对应的期望效用模型来评价你对策略的偏好.

1.2.2　灵敏度分析

由于对概率和效用的评估都具有主观性，不同的具体问题对评估精度的要求通常不一样，而评估的精度要求与所付出的代价和工作量常常是成正比的，因此，在对策略优劣进行评估时，非常有必要作灵敏度分析．对于影响选择最优策略敏感的概率评估或效用评估，可通过收集和综合新信息来对其作进一步的分析．灵敏度分析通常会涉及到大量的数学计算，但这是不可避免的工作．

2　主观概率

2.1　概率的数学结构

概率论作为数学的一个分支，它的整个理论体系可以建立在一组抽象的、纯形式的公理基础之上，这组公理是从概率概念所应具有的运算性质中提炼出来的，并不需要与现实世界中某类特殊现象专门对应．科尔莫戈罗夫（A. N. Kolmogorov）在1933年建立的概率公理系统，即是这样一种纯数学形式的概率理论．

定义1　设 S 为非空集，$\mathscr{S}$为 S 的某些子集所组成的集类，若

1° $S\in\mathscr{S}$,

2° $A\in\mathscr{S}\Rightarrow A^c\in\mathscr{S}$,

3° A、$B\in\mathscr{S}\Rightarrow A\cup B\in\mathscr{S}$,

则称 $\mathscr{S}$为 S 上的一个代数．此外，若 $\mathscr{S}$还对可数和运算封闭，即 $A_i\in\mathscr{S}$, $i=1,2,\cdots$, $\Rightarrow\bigcup\limits_{i=1}^{\infty}A_i\in\mathscr{S}$,则称 $\mathscr{S}$为 σ 代数．

定义2　设 S 为非空集，$\mathscr{S}$是 S 上的一个 σ 代数，若映射 $P:\mathscr{S}\to R$ 满足

1° 非负性　$P(A)\geqslant 0$　　$(\forall A\in\mathscr{S})$,

2° 规范性　$P(S)=1$,

3° 完全可加性　$P(\bigcup\limits_{i=1}^{\infty}A_i)=\sum\limits_{i=1}^{\infty}P(A_i)$,

其中 $A_i\in\mathscr{S}$, $i=1,2,\cdots$, $A_i\cap A_j=\varnothing$, $i\neq j$,则称 P 为 S 上的一个概率．

以上关于概率的数学定义，并不需要追究 S 的具体含义，S 只是一个抽象的非空集合，S 中的元素称为基本事件，S 的子集称为事件．为了便于讨论事件之间的关系，如逆事件、联合事件等，把事件域定义为 S 上的一个代数或 σ 代数，概率是给事件域中每一个事件 A 赋予一个实数值 $P(A)$的特殊映射 P，事件 A 的概率 $P(A)$可理解为 A 会发生的可能性的度量．由定义2中三条公理演绎出来的逻辑结果构成了概率论的主体．下面是一些简单结果．

1° $P(\varnothing)=0$;

2° $0\leqslant P(A)\leqslant 1$;

3° 若$A\subset B$,则 $P(A)\leqslant P(B)$;

4° $P(A\cup B)=P(A)+P(B)-P(A\cap B)$;

5° 若事件$A=\{e_1,e_2,\cdots,e_n\}$,则 $P(A)=\sum_{i=1}^{n}P(e_i)$.

概率公理也是在实际中应用概率的指导原则.在这套理论框架下,由任何具体方法获得的概率估计都应满足上述公理.

2.2 主观概率

虽然在概率的数学结构中可以不追究概率的含义,但在获得概率的具体方法上,以及在概率的实际应用中,却无法避免这一问题.一般地,为了适应数理统计的需要,上述定义中的集合 S 被称为样本空间,定义为能够在相同条件下重复进行的随机试验(观察)的所有可能结果.相应的事件称为随机事件,随机事件的概率因而具有频率稳定值的解释,称这种解释为客观概率.由于对概率的这种频率解释不适合决策分析和许多实际应用领域里对概率的要求,因此,许多人对概率的含义进行了各种各样的解释.鉴于这些解释大都是从决策者个人的角度来看待此概念的,因此,称概率的这类解释为主观概率.

主观概率的理论可以自成一个体系,并与科尔莫戈罗夫的数学公理相互协调,这主要是由拉姆齐和德·芬尼逖提出的.与客观概率的解释相平行,主观概率理论把 S 解释为状态空间,它由一组具有不确定性的事物所组成,并把这些事物称之为状态或基本事件.例如,令基本事件为掷一粒骰子可能出现的结果,则状态空间可表示为 $S=\{1,2,\cdots,6\}$,这时它与样本空间完全一致.又如,令 $S=\{$埃及金字塔是由古埃及人建成的;埃及金字塔不是由古埃及人建成的$\}$,或 $S=\{$中国人在 2005 年抽烟的人数$\}$,这时,状态空间已不再是可以重复的随机试验所产生的结果,但状态空间必须概括所有可能的不确定状态,使所列举的状态中有且仅有一个状态为真,或者说有且仅有一个基本事件会发生.状态空间与通常意义下的样本空间在含义上的差别常常是引起概率含义争议的起因.

主观概率论强调个人对可能性的主观信念,这种主观信念可以用一个二元关系$\succ$来表达,$A\succ B$ 表示事件A 比事件 B 更可能发生.在效用理论里,二元关系$\succ$被用来表示对策略或后果的偏好,在这里却表示对不确定因素的可能性信念.二者的含义不同,但结构上却非常类似.主观概率完全可以和效用理论一样,从表达信念的二元关系出发,通过规定一组适当的公理假设,把理论体系建立在这组公理的逻辑基础上.

定理 1 设状态空间 S 非空,$\mathscr{S}=\{A\}$为 S 的全体子集,$\succ$为 $\mathscr{S}$上的一个二元关系,并且满足

1° 非$\varnothing\succ A$,

2° $S\succ\varnothing$,

3° $\succ$是弱序,

4° $A\cap C=B\cap C=\varnothing\Rightarrow(A\succ B\Leftrightarrow A\cup C\succ B\cup C)$,

5° $A \succ B \Rightarrow$ 存在 S 的有限分割 $S = \sum_{i=1}^{n} C_i$ 使 $A \cup C_i \succ B, i = 1,2,\cdots,n$，则存在唯一的(概率)测度 $P: \mathscr{S} \to R$，使

① $P(A) \geqslant 0$,

② $P(\varnothing) = 0$,

③ $P(A \cup B) = P(A) + P(B), A \cap B = \varnothing$,

此外还满足：

④ $A \succ B \Leftrightarrow P(A) > P(B)$,

⑤ $\forall B \subset S$ 及 $0 \leqslant \rho \leqslant 1$，有 $C \subset B$，使 $P(C) = \rho P(B)$.

条件3°中的关于"弱序"的含义将在3.1节里给出严格的定义，关于独立性条件4°也可以对照3.4节关于效用理论的同名条件来理解. 条件5°与结论中关于概率的连续性⑤有关，对概率来说不是本质的.

该定理表明，只要$\succ$满足一组适当的假设，就能推导出存在 S 上的一个满足非负性、规范性和可加性的概率 P. 更有趣的是，只要对$\succ$的假设条件作适当的改变或放宽，则结论中 P 的性质也会相应地改变，甚至与科尔莫戈罗夫的概率公理不一致. 这方面的研究可参阅文献[8].

2.3 主观概率的估计方法

2.3.1 先验信息与贝叶斯原理

如果仅作为一个概念或一种表达而不追究其含义的话，那么决策分析中所用到的概率概念都可以理解为科尔莫戈罗夫公理意义下的概率，这样做并不会引起混乱. 主观概率与客观概率的本质差别，应该体现在实际应用中获得概率的具体方法上，而不是在字面上探讨它们的哲学含义.

在获得概率的方法上，主观概率与客观概率的根本分歧在于是否接受"先验概率". 人们把未作任何试验之前对不确定事件所作的概率估计称为**先验概率**；相应地，把在现有新证据条件下推算出来的概率称为"后验概率". 先验概率的思想最早由贝叶斯提出来，后来逐渐形成了一个力量强大的学派，是主观概率论最有力的支持者. 贝叶斯的基本思想在现行的概率论教科书中被表达成关于条件概率的贝叶斯公式.

实际生活中，对于一个不确定事件来说，根据过去的经验和知识，总会或多或少地对这一不确定事件有些了解，所有这些有关的信息就称为先验信息. 在先验信息基础上所作的概率估计就是先验概率，对应的概率分布和概率密度分别称为先验分布和先验密度，由先验信息估计先验分布或密度是获得主观概率的基础.

获得客观概率的数理统计方法是，直接通过从统计实验得到的样本信息来估计概率分布或概率密度，而贝叶斯方法则既接受先验信息又不排斥样本信息(如果可能得到的话)等任何可以利用的新证据，因而具有更多的灵活性. 但由于先验概率的设定是否恰当对结果的影响常常很大，客观概率论者认为贝叶斯方法缺乏客

观性.好在实践已经证实贝叶斯方法的确是获得概率的一种有效方法,并从实践中总结出了许多设定先验概率的实用方法.

设 S 为自然状态空间,为了估计 S 上的先验概率,惯用的做法是考虑一个反映状态不确定性的变量 θ,θ 的取值全体称为参数空间,记作 Θ. 主观概率的贝叶斯方法通常把 θ 看作 Θ 上的随机变量,然后估计 θ 的概率分布或概率密度.

2.3.2 确定离散事件的概率

确定离散事件的概率是最基本的过程,连续状态和其他奇异状态的概率分布大都可以用离散方法来近似,特别是转化为考虑只有有限个基本事件的概率分布.设 $E_1,E_2,\cdots,E_n$ 是一组完备事件,要估计每一个 E_i 的概率 $P(E_i)$,一般有如下一些方法.

1. 基于物理现象来判断

在某些情况下,有理由推断一个试验的所有可能事件是等可能的,因此,若有 n 个事件,每个事件的概率就是 $\frac{1}{n}$. 例如,掷一枚均匀的硬币,出现正面的概率为 $\frac{1}{2}$;掷一枚均匀的骰子出现"6"点的概率为 $\frac{1}{6}$.

2. 基于数据和模型来判断

如果存在有关事件可能发生的数据,则可以用它来确定概率.例如,某城市最近25 000次失火警报中有10 000次是谎报,则一次报警为谎报的概率可望定为0.4.如有新的证据,可根据贝叶斯公式修改原来的概率估计.在许多场合下,数据可能更详细,这时可构造一个解析模型或模拟模型,把各输入变量同重要的输出变量联系起来,利用这种模型,关于输入变量发生的概率数据可用于形成所需求的输出变量的概率.在财产和意外保险精算学中,常用模拟方法来获得对潜在损失的概率分布,这方面的专门技术可参阅文献[9].

3. 概率盘方法

在几乎没有任何历史数据的情况下,只好完全依赖于决策者的直觉来作判断.其基本原理是比较如图2-1所示的两个抽签 L_1 与 L_2. L_1 抽象地表示以概率 P 获得奖金 x_1,以概率 $1-P$ 获得奖金 x_2 的一个抽奖;而 L_2 则是以所要评估的特定事件 E 来设置抽奖,E 发生时得奖金 x_1,E 不发生时得奖金 x_2. 其中 x_1 优于 x_2. 对 P 的一个特定值问决策者哪一个抽奖为优或者是否相当.如果 L_1 优于 L_2,则减少 P 值;如果 L_2 优于 L_1,增加 P 值.重复上述过程,经过若干次重复后可定出 P 值,使 L_1 与 L_2 相当,E 的概率就是 P.

斯坦福大学的霍华德(Howard)教授设计的概率盘(图2-2)是把这种自觉判断过程模型化,先将一个圆盘划分为两个扇形区,分别为橙色和蓝色,假定有一随机事件发生在盘内任何一点是等可能的,则利用发生在橙色区内得奖金 x_1,发生在蓝色区内得奖金 x_2 的抽签与 L_1 相比较,当调整两区域面积使得决策者认为 L_1 与 L_2 无差别后,查阅圆盘反面的刻度即得到 $P(E)$ 的估计值.

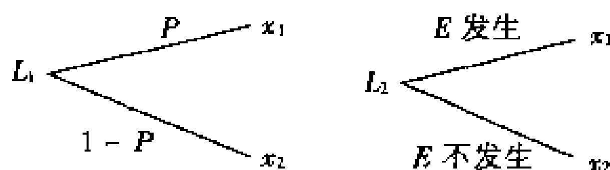


图 2-1

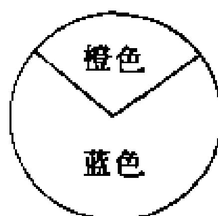


图 2-2

4. 最大熵法

设 $\Theta=\{\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_n\}$ 为状态所对应的参数空间,假定 $(p_1,p_2,\cdots,p_n)$ 是其上的一个概率分布,则状态的不确定程度可用以概率分布 $(p_1,p_2,\cdots,p_n)$ 定义的熵(平均信息量)来刻画,即

$$E=-\sum_{i=1}^{n}p_i\ln p_i. \tag{2-1}$$

如果对哪个状态为真毫无了解,则状态的不确定性最大,最大值为

$$E_{\max}=\ln n,$$

对应的概率分布为

$$p_i=\frac{1}{n},\qquad (i=1,2,\cdots,n);$$

相反,如果已知出现某 θ_i 的概率为 1,其余为 0,则不确定性最小,熵 $E_{\min}=0$. 因此,如果对状态有一定的了解,则可以把这部分信息作为一组约束条件,通过在这组约束条件下求熵的最大值获得概率估计. 例如,知道状态变量的平均值等于 5 这一信息,则可化为求解极值问题:

$$\max\left(-\sum_{i=1}^{n}p_i\ln p_i\right),$$

$$\text{s.t.}\sum_{i=1}^{n}\theta_i p_i=5\ \&\ \sum_{i=1}^{n}p_i=1\qquad(p_i\geqslant 0),$$

来获得先验概率 $(p_1,p_2,\cdots,p_n)$,这种方法称为最大熵法. 由杰恩斯(Jaynes, 1968)正式提出的这一方法已成为估计先验概率的常用方法之一.

最大熵法在实际应用中会遇到一些问题,诸如解的存在性及计算量大等问题,对这些问题的更深入的讨论可参见文献[2].

值得强调的是,对于一组完备事件 $E_1,E_2,\cdots,E_n$,决策者应验证所估计的概率 p_i 是否满足

$$\sum_{i=1}^{n}p_i=1,$$

若不成立,就应当修改估计值.

2.3.3 确定连续状态的先验(分布)密度的方法

1. 匹配法

估计连续型不确定变量 θ 的先验密度(或先验分布)的常用方法之一是,先假

定 θ 服从某类特殊的理论分布类型，如正态分布、指数分布或伽玛分布等等，具体选择哪种分布类型仍取决于对各类具体问题的认识，包括决策者的经验、学识等先验信息；然后，对其中的未知参数作出估计，即可得到先验密度（分布）. 对参数进行估计时，各种方法都可以采用.

估计先验矩常常会遇到这样的困难：一方面，先验密度的尾部对先验矩的影响很大；另一方面，尾部的概率很小，难以准确估计，当参数空间 Θ 无界时，尤其如此. 例如，一密度曲线的尾部在 $(0, +\infty)$ 上形如 $k\theta^{-2}$，由于 k 很小，这个尾部只有微不足道的概率. 但其矩为无限大，因为对于任何 $b>0$，有

$$\int_b^{+\infty}\theta(k\theta^{-2})\mathrm{d}\theta = \infty .$$

为了恰当地使用匹配法估计先验密度，最好是把匹配法与下面介绍的离散化方法相结合，比如先确定先验密度的几个分位数点，知道了密度曲线的大体轮廓后，再选择恰当的分布类型和相应的参数与之匹配.

2. 分位点法

设 θ 为 Θ 上的连续型随机变量，若 $P\{\theta\leqslant x_\alpha\}=\alpha$，则称 x_α 为 θ 的分布函数的 α 分位点. 先求出 θ 的分布函数的一些点，然后用一条曲线来拟合这些点即得先验分布函数，其导数函数则是先验密度. 首先评定 $\alpha=0.5$ 的分位点，问决策者"使 θ 大于 x 或小于 x 的可能性相等的量 x 是多少?"获得的答案即是 $x_{0.5}$. 其次再进一步问"如果事实上已给定 θ 小于 $x_{0.5}$，那么 x 的何值将区间 $(-\infty, x_{0.5}]$ 分成等可能的两部分?"答案是 $x_{0.25}$，同样地可得到 $x_{0.75}$. 最后再估计 $x_{0.01}$ 与 $x_{0.99}$，问"要使 θ 小于 x 的概率是 0.01，以及使 θ 大于 x 的概率是 0.99，应当分别选取什么值?"照此下去，得到一串分位数点 (x_{α_k}, α_k)，在平面坐标上连结这些点所形成的一条光滑曲线就是 θ 的分布曲线.

3. 相对似然法

相对似然法也是估计先验密度的常用方法之一. 其基本思想是在参数空间 Θ 内比较几个特殊点的似然性，然后再用曲线拟合这些点得到先验密度. 例如，要估算某商品明年销售量的分布密度，先假定销售量在两个确定量（比如一千件到一万件）之间，然后询问在这个区间中最可能的销售量是多少件？最不可能的销售量是多少件？再问最可能的销售量的可能性是最不可能的销售量的可能性的多少倍？这样就确定了它们的相对似然值，最后再选择其他几个销售量去分别确定它们对最可能销售量的相对似然值. 由此可以近似地得到一条非正常（not proper）先验密度曲线. 非正常的意思是指密度的积分不等于 1，还需要乘上一常数才能使它正常化.

4. 直方图法

设参数空间为 Θ，把 Θ 划分为若干区间段，决策者根据他的先验知识去评定 θ 落在每个小区间段中的概率，相当于评定一组完备事件集 $E_1, E_2, \cdots, E_n$ 的概率，这样就可以给出先验密度的直方图（图 2-3），根据直方图再绘制一条光滑的密度函数曲线.

用上述方法评定先验概率所遇到的共同困难是小概率事件的概率难以评定，

因此,需要设计能够专门处理这一矛盾的特殊方法.

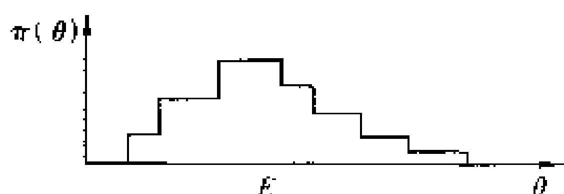


图 2-3

2.3.4　贝叶斯原理

尽管已经有了一系列评定主观概率的方法,但要准确地估计出主观概率仍旧是一件困难的事情,主要原因在于先验信息不够充分,而决策者往往只能凭所获得的先验信息对状态发生的概率作主观估计.在先验信息不充分的条件下所作的主观估计当然就难以准确地反映客观真实情况.为了提高决策分析的可靠性,最有效的途径是通过试验去收集有关状态的新信息,用以改进对先验概率的估计.这里所指的试验,不仅仅指统计试验,而且指能够获取新信息的一切手段.例如,在出门之前判断是否会下雨的概率时,先听一下电台广播的天气预报,得到了未来天气的信息,就作了一次试验;医生在开药方之前,量一下病人的体温和血压也是作试验.一般地,通过试验并不能直接观察到 θ 的值,只能观察到另一个与 θ 有关的量 v,称之为观察变量,观察变量的取值范围记为 Z,仍把 v 看作是 Z 上的随机变量.

设 θ 的先验密度为 $\pi(x)$,在已知 $\theta=x$ 的条件下,v 的条件密度为 $f(y|x)$.贝叶斯定理指出,通过试验收集得到新信息后,由观察 v 确定的后验密度 $\pi(x|y)$ 是

$$\pi(x|y)=f(y|x)\frac{\pi(x)}{m(y)},\tag{2-2}$$

其中 $f(y|x)$ 称为似然函数;$m(y)$ 称为预测密度,当 θ 为连续变量时,$m(y)=\int_{\Theta}f(y|x)\pi(x)\mathrm{d}x$,当 θ 为离散变量时,$m(y)=\sum_{x_i\in\Theta}f(y|x_i)\pi(x_i)$.

获得 θ 的后验分布后,通过引入一个具有主观含义的"损失函数"来刻画未知参数 θ 与其估计值 $\hat{\theta}$ 的偏差程度,再通过求最小平均损失来获得 θ 的贝叶斯估计,具体过程可参阅文献[2].

3　效用与期望效用理论

3.1　偏好与二元关系

效用是对决策者价值观念的定量描述.决策者的价值观念具有两方面的含义:一方面是定性的比较,例如,对于方案 f,g 和 h,我喜欢 f 甚于 g,喜欢 g 甚于 h;另

一方面则是相对定量的比较，例如，相对于 h 来说，我喜欢 f 的程度比喜欢 g 的程度强烈. 习惯上，前者叫做偏好，用一个称为"序"(order)的二元关系来描述；后者叫做效用，用一个称为"效用函数"的实值函数或泛函来刻画，二者是紧密联系在一起的.

设 D 是一个非空集合，乘积集

$$D\times D=\{(x,y)\mid x,y\in D\}$$

的一个子集 R 称为 D 上的一个二元关系. 对于 $x,y\in D$，若 $(x,y)\in R$，则称 x 与 y 有关系，记为 xRy；若 $(x,y)\notin R$，则称 x 与 y 没有关系，记为 $x\bar{R}y$. 二元关系 R 有下列八种常见的性质，依次可分为四对：

1° 自反性(reflexivity)　xRx；

2° 非自反性(irreflexivity)　$x\bar{R}x$；

3° 对称性(symmetry)　若 xRy，则 yRx；

4° 非对称性(asymmetry)　若 xRy，则 $y\bar{R}x$；

5° 传递性(transitivity)　若 xRy 且 yRz，则 xRz；

6° 负传递性(negative transitivity)　若 $x\bar{R}y$，$y\bar{R}z$，则 $x\bar{R}z$；

7° 连接性(connectedness)　xRy 或 yRx；

8° 弱连接性(weak connectedness)　若 $x\neq y$，则有 xRy 或者 yRx.

一个二元关系不可能同时具有以上性质，只能具有其中一部分性质，通常把传递的二元关系称为序，还可以定义各种序. 对于具有非对称性的二元关系，常用记号 $\succ$ 或 $\prec$ 表示.

定义 1　设 R 为集合 D 上的一个二元关系，

1° 如果 R 是非对称和负传递的，则称 R 是一个**弱序**；

2° 如果 R 是弱连接的弱序，则称 R 是个严格弱序；

3° 如果 R 是自反、传递和对称的，则称 R 是一个等价关系.

例如，设 D 为实数集，则"大于"关系"$>$"是个弱序，也是严格弱序；"等于"关系"$=$"是等价关系.

设 $\succ$ 是一个弱序，如果 $x\succ y$，称 x 优于 y，或称 y 劣于 x；如果既非 $x\succ y$，又非 $y\succ x$，则称 x 与 y 无差别，记为 $x\sim y$. 此外，如果 $x\succ y$ 或者 $x\sim y$，则称 x 不劣于 y，或称 y 不优于 x，记为 $x\succeq y$.

用弱序作为比较后果和策略的出发点是很自然的，其中非对称性的要求表示决策者选择方案的协调性，如果你认为 y 优于 x，就不能同时又认为 x 优于 y. 由非对称和负传递性还能推导出传递性等许多性质.

命题 1　设 $\succ$ 是 D 上的弱序，则

1° 对于任意的 $x,y\in D$，三种关系 $x\succ y$，$y\succ x$ 和 $x\sim y$ 有且仅有一种成立；

2° $\succ$ 是传递的；

3° $\sim$ 是等价关系；

4° 由 $x\succ y,y\sim z\Rightarrow x\succ z$，以及由 $x\sim y,y\succ z\Rightarrow x\succ z$；

5° $\succeq$ 是传递和连接的；

6° 在等价类 $D/\sim=\{a\mid a\subset D,\forall x,y\in a,x\sim y\}$ 上定义的关系 $\succ^*$：$a\succ^* b\Leftrightarrow x\succ y$，对于某个 $x\in a$ 和 $y\in b$ 成立，则 $\succ^*$ 是严格弱序.

3.2 效用函数与风险态度

3.2.1 效用函数

1.1节中已描述性地定义了效用函数.设1.1节中定义1的 D 为后果集 X,那么,决策者关于后果的效用函数 $u(x)$ 是否存在呢?这相当于问决策者对于一组确定的后果的偏好是否可以被定量地表达?

定理1 若二元关系 $\succ$ 在 X 上是一个弱序,而在等价类集合 $X/\sim$ 中有一个稠密的可数子集,则关于后果的效用函数存在的充分必要条件是存在 X 上的实值函数 $u(x)$,使

$$x \succ y \Leftrightarrow u(x) > u(y) \qquad (\forall x, y \in X).$$

该定理是关于决策者在后果集上的效用函数存在性的一个理论结果,其中 $X/\sim$ 的某个可数子集 C 在 $X/\sim$ 中稠密的含义是指,按照本章命题1中6°定义的等价类和引入的 $\succ^*$,对于任意两个元素 $a, b \in X/\sim$,且 $a \succ^* b$,一定有元素 $c \in C$,使得 $a \succ^* c \succ^* b$ 成立.

正如在1.1节中所强调的,决策后果不一定是可以用金额值表达的数值后果.对于任何后果都可以评价其效用,但在这一节中所讨论的效用函数都以数值后果集形式出现,它们适用于与金融有关的决策问题.正像讨论一些特殊的概率分布一样,人们也常常讨论一些特殊的效用函数类型,它们能表达某种类型的偏好结构.这些效用函数类型有:

(1) 抛物线型 $u(x) = x - \dfrac{1}{2c}x^2 \qquad (x \in [0, c], c > 0)$;

(2) 指数型 $u(x) = -\exp(-\alpha x) \qquad (\alpha > 0)$;

(3) 对数型 $u(x) = \log x \qquad (x > 0)$;

(4) 幂函数型 $u(x) = \dfrac{x^\beta}{\beta} \qquad (\beta > 0)$.

3.2.2 风险态度

要评价某个决策者关于某件事情或某种风险的态度,必须明确这件事情或"风险".虽然关于风险这个概念本身的定义和解释多种多样,但可以约定,决策分析中所讨论的风险可在数学上被表达为一个概率分布.简单的概率分布可以理解为某种抽签,比如,把概率分布{0,0.5;100,0.5}解释为一个以50%的机会抽得100块钱和同样的机会什么也抽不到的抽签,这个抽签的平均值是50元.衡量该决策者风险态度的基本想法就是看他是愿意进行抽签还是愿意稳拿50元.若愿意抽签,则说他是风险偏好的;若宁愿拿平均值50元,则说他是保守型或风险厌恶的;若对二者都无所谓,则是风险中立的.

一个人的风险态度不可能在任何情况下都保持同一类型,通常与值的财富水平有关.如果在任何财富水平上均厌恶风险,则称他是绝对厌恶风险的.因此,讨论

风险时,限定问题的范围是必要的.但由于难以对各种具体问题一一讨论,也不可能建立一个统一理论模型适应所有问题,因此,这里介绍的模型只能作为一种理论参考.

讨论风险时,首先要把具体问题的得失范围定下来.比如,最坏的后果值是 a、最好的后果值是 b,那么就在区间 $[a,b]$ 上讨论问题,用 $[a,b]$ 中的值,包括 a,b 本身来构造一系列抽签,并利用这些抽签来评价决策者的风险态度.

为了把决策者的风险态度与他的效用函数联系起来,设决策者在区间 $[a,b]$ 上的效用函数为 $u(x)$.如果 $u(x)$ 是一条直线,比如

$$u(x)=cx+d,$$

则可将 $[a,b]$ 中的任何点 x 表达为

$$x=\alpha b+(1-\alpha)a \qquad (0\leqslant\alpha\leqslant1).$$

而它的效用值则为

$$u(x)=u(\alpha b+(1-\alpha)a)=\alpha u(b)+(1-\alpha)u(a),$$

即 $[a,b]$ 中任何一点 x 的效用与抽签 $\{b,\alpha;a,1-\alpha\}$ 的效用(期望效用)一样,风险态度是"中立"的;若 $u(x)$ 是一条上凸的曲线,即 $u''(x)<0$(u' 表示 u 的导数),则曲线 $u(x)$ 的位置高于 $(a,u(a))$ 与 $(b,u(b))$ 之间的连线,因此,有

$$u(x)\geqslant\alpha u(b)+(1-\alpha)u(a) \qquad (0\leqslant\alpha\leqslant1),$$

即 $[a,b]$ 中任何一点 x 的效用都比抽签 $\{b,\alpha;a,1-\alpha\}$ 的效用(期望效用)要大,决策者不愿意抽签,因此,说他是厌恶风险的;若 $u(x)$ 是一条下凹的曲线,即 $u''(x)>0$,则曲线 $u(x)$ 的位置低于 $(a,u(a))$ 与 $(b,u(b))$ 之间的连线,因此,有

$$u(x)\leqslant\alpha u(b)+(1-\alpha)u(a) \qquad (0\leqslant\alpha\leqslant1),$$

即 $[a,b]$ 中任何一点 x 的效用都比抽签 $\{b,\alpha;a,1-\alpha\}$ 的效用(期望效用)要小,决策者更愿意选择抽签,因此,说他是追求风险或风险偏好的.如图 3-1 所示,决策者的风险态度被分为三种类型,分别对应着他的效用曲线为上凸、下凹和直线三种情况,但由伯努利的边际效用递减原理可知,最普遍的是厌恶风险的情况,效用曲线如图 3-2 所示.

表 3-1 所示的为风险态度及其衡量指数.

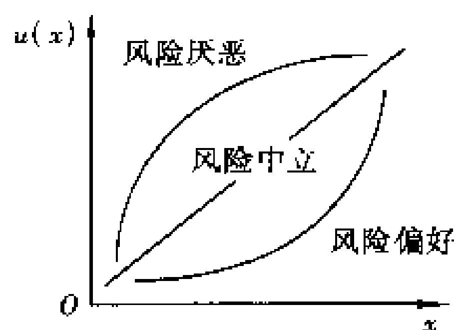


图 3-1

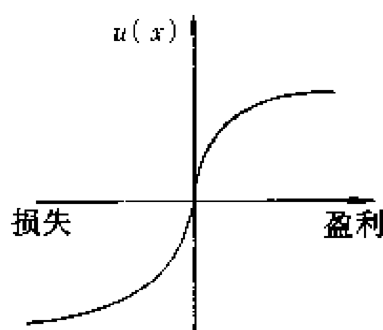


图 3-2

定理 2 (詹森(J. L. W. Jensen)不等式) 设某决策者的效用函数 $u(x)$ 满足 $u'(x)>0$, $u''(x)<0$,即该决策者是厌恶风险的,则对于随机变量 X,

$$E[u(X)]\leqslant u(E[X]) \tag{3-1}$$

表3-1

风险态度	效用曲线的凸凹性	阿罗-普拉特指数
风险厌恶	上凸($u''(x)<0$)	$R_a(x)>0$
风险中立	直线($u''(x)=0$)	$R_a(x)=0$
风险偏好	下凹($u''(x)>0$)	$R_a(x)<0$

成立.

既然决策者的风险态度可以用效用函数的凸凹性来区别,为了进一步衡量风险态度的程度,或是比较不同决策者之间风险态度的差异,也可以进一步用效用曲线的凸凹程度来定量地刻画风险态度.普拉特(Pratt,1964)和阿罗(K.J.Arrow,1965)提出过两种用效用函数来度量风险态度的指数,称为绝对风险指数和相对风险指数,统称阿罗-普拉特指数.

设决策者的效用函数 $u(x)$ 定义在区间 $[a,b]$ 上,并且是二次可微的,则可以定义关于决策者风险态度的绝对风险指数和相对风险指数分别为

$$R_a(x)=-\frac{u''(x)}{u'(x)}, \tag{3-2}$$

$$R_r(x)=-x\frac{u''(x)}{u'(x)}. \tag{3-3}$$

阿罗-普拉特指数不仅可以用于衡量一个决策者的风险态度的相对程度,也可以用来比较两个决策者之间风险态度的差异.比如,设决策者A和决策者B的效用函数分别为 $u_a(x)$ 和 $u_b(x)$,相应的绝对风险指数为 $R_{aa}(x)$ 和 $R_{ab}(x)$,若成立 $R_{aa}(x)\geqslant R_{ab}(x)$,$\forall x\in[a,b]$,则称A比B更厌恶风险.容易看到,$R_r(x)=xR_a(x)$,相对指数反映了决策者风险态度随着财富值的变化情况,尤其是反映了决策者的风险态度对应着正的财富值 $x>0$(理解为盈利)和负的财富值 $x<0$(理解为损失)会出现两种不同的态度,正如在买保险时是厌恶风险的,而在买彩票时又是追求风险的,这与图3-2所示的效用曲线一致.

3.3 混合集与策略空间

决策者往往希望通过分析和比较对后果的偏好来获得对策略的偏好.先假定他有一个偏好关系定义在策略空间 F 上,然后找到刻画这个偏好关系的定量模型,为此,需要分析策略空间的结构.

决策分析中,描述策略的方式通常有两种:一种是萨维奇的方法,即把每项策略 f 看作是从状态空间 S 到后果空间 X 上的一个映射,当决策者的偏好关系满足某些公理假设时,这组公理蕴含着存在决策者关于状态空间上的主观概率测度 p,以及存在后果空间 X 上的效用函数 u,使得决策者关于策略的偏好可以由期望效用值来表征.也可以作个变换,对于每项策略 $f\in F$,定义

$$p_f(A)=p(\{s:s\in S,f(s)\in A\}),$$

其中 $A\in\mathscr{B}$,$\mathscr{B}$ 是 X 上的某个 σ 代数,则 p_f 是后果空间 X 上的一个概率测度,从

而,每项策略可以看作是后果空间 X 上的一个概率测度.描述策略的另一种方式就是把 X 上的概率测度集作为策略空间.最常用的概率测度是简单概率测度,它的含义是采取某项策略只可能产生有限个后果.

定义 2 设 $\mathscr{B}$ 为 X 的全体子集类,若映射 $p:\mathscr{B}\to R$,满足

1° $p(A)\geqslant 0 \qquad (\forall A\in\mathscr{B})$,

2° $p(X)=1$,

3° $p(A\cup B)=p(A)+p(B) \qquad (\forall A,B\in\mathscr{B}$,且 $A\cap B=\varnothing)$,

4° 存在 X 的有限子集 A,使 $p(A)=1$,

则称 p 是 X 上的简单概率测度.

特别地,把每一后果 x 看作一个退化的简单概率测度,记为 δ_x.对于 $A\subset X$,若 $x\in A$,则 $\delta(A)=1$;若 $x\notin A$,则 $\delta_x(A)=0$.这样一来,决策者关于后果的偏好关系 $\succ_*$ 可以由关于策略的偏好 $\succ$ 引入:对于 $x,y\in X$,

$$x\succ_* y\Leftrightarrow\delta_x\succ\delta_y.$$

但一般情况下,将使用同一记号.

对于 X 上的概率测度 p,Q 及实数 $\alpha\in[0,1]$,定义 $\alpha p+(1-\alpha)Q$ 为

$$(\alpha p+(1-\alpha)Q)(A)=\alpha p(A)+(1-\alpha)Q(A) \qquad (\forall A\in\mathscr{B}),$$

则 $\alpha p+(1-\alpha)Q$ 也是 X 上的一个概率测度.对于简单概率测度 p,由定义 2 中的性质 4°,存在 X 的有限子集 $\{x_1,x_2,\cdots,x_n\}$,使得

$$p(\{x_i\})=p(x_i)=p_i>0 \qquad (i=1,2,\cdots,n),$$

且 $\sum_{i=1}^{n}p_i=1$,因此,p 可以分解为

$$p=\sum_{i=1}^{n}p_i\delta_{x_i},$$

称其为一个抽奖(lottery),理解为以概率 p_i 得到后果 x_i,$i=1,2,\cdots,n$.

由于 X 上的概率测度全体是一个凸集,抽象地,把策略空间看作是如下定义的混合集.

定义3 非空集合 F 被称为混合集是指对于任意的 $P,Q\in F$ 及 $\alpha\in[0,1]$,在 F 中有对应元素(记为 $\alpha P+(1-\alpha)Q$),且对于任意的 $P,Q\in F$ 及 $\alpha,\beta\in[0,1]$,有

1° $1P+0Q=P$,

2° $\alpha P+(1-\alpha)Q=(1-\alpha)Q+\alpha P$,

3° $\alpha(\beta P+(1-\beta)Q)+(1-\alpha)Q=\alpha\beta P+(1-\alpha\beta)Q$.

这里,混合运算 $\alpha P+(1-\alpha)Q$ 可以理解为以概率 α 选择 P 和以概率 $1-\alpha$ 选择 Q 的抽签.

3.4 效用理论基本定理

效用理论的特点是先建立一组关于对策略的偏好公理,这组公理规范了决策者对风险策略偏好应该持有的"理性",从这组公理出发就可以推导出决策者关于

策略的偏好能够用后果的期望效用值定量地表达.

冯·诺伊曼和摩根斯顿于1944年开创性地为经典效用理论建立了一组公理,这些公理经过学者们不断的精炼,其基本思想被简化为下面三条公理.

公理1(弱序公理) $\succ$是定义在策略空间 F 上的弱序.

公理2(阿基米德公理) 若 $P\succ Q, Q\succ R$,则存在 $\alpha,\beta\in(0,1)$,使

$$Q\succ\beta P+(1-\beta)R$$

及

$$\alpha P+(1-\alpha)R\succ Q.$$

公理3(独立性公理) 若 $P\succ Q$,则对于任意的 $\alpha\in(0,1)$及 R,有

$$\alpha P+(1-\alpha)R\succ\alpha Q+(1-\alpha)R.$$

由弱序的性质不难理解弱序公理是一条综合了传递、非对称等性质的偏好假设.阿基米德(Archimedes)公理说明人的偏好不是绝对的,是可以折衷的,只要你认为 P 优于 Q, Q 优于 R,则无论你对 P 的偏好有多强烈,总可以掺入足够成分的 R,使产生的混合(抽签)劣于 Q;反之,不管 R 是多么不受欢迎,总可以掺入足够成分的 P,使产生的混合优于 Q.独立性公理是经典效用理论的核心,尽管它的含义很直观:P 与 Q 之间的优劣关系不受(按相同比例)混入的其他元素的影响.但独立性(以及由弱序包含的传递性)一直是引起争议的焦点.

由公理1、公理2和公理3所蕴含的下面几条偏好性质是证明效用函数基本定理1的关键性质,它们本身也可独立地作为公理使用.

命题2 设 F 为混合集,$\succ$定义在 F 上,且满足公理1、公理2和公理3,则对于任意的 $P,Q,R,T\in F$,有

1° 单调性 $(P\succ Q,0\leqslant\alpha<\beta\leqslant1)\Rightarrow\beta P+(1-\beta)Q\succ\alpha P+(1-\alpha)Q$;

2° 连续性 $(P\succeq Q,Q\succeq R,P\succ R)\Rightarrow$存在唯一的 $\alpha\in[0,1]$,使

$$Q\sim\alpha P+(1-\alpha)R;$$

3° 混合优势性 $(P\succ Q,R\succ T,0\leqslant\alpha\leqslant1)\Rightarrow\alpha P+(1-\alpha)R\succ\alpha Q+(1-\alpha)T$;

4° 无殊性 $(P\sim Q,0\leqslant\alpha\leqslant1)\Rightarrow\alpha P+(1-\alpha)Q\sim P$;

5° 替换性 $(P\sim Q,0\leqslant\alpha\leqslant1)\Rightarrow\alpha P+(1-\alpha)R\sim\alpha Q+(1-\alpha)R$.

定理3 设 F 是一个混合集,偏好关系$\succ$在 F 上满足公理1、公理2和公理3的充分必要条件为:

1° 存在 F 上的实值函数 U,对于任意的 $P,Q\in F$,有

$$P\succ Q\Leftrightarrow U(P)>U(Q);$$

2° 对于任意的 P、$Q\in F$ 及 $\alpha\in[0,1]$,有

$$U(\alpha P+(1-\alpha)Q))=\alpha U(P)+(1-\alpha)U(Q).$$

此外,U 在正线性变换意义下是唯一的:若有 F 上的函数 V 也满足1°和2°,则存在常数 $a>0$ 和 b,使

$$V(P)=aU(P)+b\quad(\forall P\in F).$$

函数 U 称为 F 上的效用函数,若把混合集 F 看作是后果空间 X 上的简单概率测度全体,特别地,对于任何 $x\in X,\delta_x\in F$,则利用效用函数 U 按概率线性的性质2°,可以容易地把关于策略的效用转化为关于后果的期望效用值.

决策者关于后果的效用定义为 $u(x)=U(\delta_x)$,其中 $x\in X$.对于简单概率 P,

设
$$P = \sum_{i=1}^{n} p_i \delta_{x_i},$$
有
$$U(P) = U(\sum_{i=1}^{n} p_i \delta_{x_i}) = \sum_{i=1}^{n} p_i U(\delta_{x_i}) = \sum_{i=1}^{n} p_i u(x_i).$$

$\sum_{i=1}^{n} p_i u(x_i)$ 称为策略 P 的期望效用值，记做 $\mathrm{EU}(P)$. 由此，可以直接得到被广泛应用的期望效用准则.

定理4 设 f 为 X 上的简单概率测度全体，F 上的偏好关系 $\succ$ 满足公理1、公理2和公理3，则存在 X 上的实值函数 u，使得

1° $\forall P, Q \in F, P \succ Q \Leftrightarrow \mathrm{EU}(P) > \mathrm{EU}(Q)$; (3-4)

2° $u(x)$ 在正线性变换意义下具有唯一性.

在许多情况下，一项策略所导致的后果可能是无限多个，因此，该策略所对应的概率测度不是简单测度. 例如，在圣彼得堡赌博问题中，"参加赌"对应的概率为
$$P: P(2^n - 100) = 2^{-n} \quad (n = 1, 2, \cdots, N),$$
因此，P 不是简单概率. 有必要把定理4中的结论推广到一般概率测度. 这时，期望效用值的表达形式不再是一个有限和，而是无穷级数或积分. 要使积分表达式
$$\mathrm{EU}(P) = \int_X u(x)\mathrm{d}P$$
有意义，自然要求效用函数 $u(x)$ 为可积函数，从而需要限制后果空间 X 和事件域 $\mathscr{B}$ 的结构，叙述该定理的结论和证明需要较多篇幅，可参见文献[7].

3.5 萨凡奇的期望效用理论

萨凡奇的期望效用理论把描述决策者关于价值偏好的合理性假设与关于不确定性的主观信念的假设用同一组合理性假设来统一表达；在形式上把自然状态和决策后果作为基本元素，而把策略作为一种功能作用定义为从状态空间到后果空间的映射；效用函数和主观概率的存在性都建立在决策者关于策略的偏好假设上. 因此，常称萨凡奇的理论为主观期望效用论.

设 S 为状态空间，X 为后果空间，$F = \{f \mid f: S \to X\}$ 为策略空间，$\succ$ 是 F 上的一个二元关系，表示决策者关于策略之间的偏好，无差别关系 $\sim$ 及 $\succsim$ 的含义如前所述. 将每一个后果 $x \in X$ 看作是一项特殊的退化策略 $f: S \to X$，其中 $f(s) = x$, $\forall s \in S$，或 $x(s) = x, \forall s \in S$. 因此，对决策者关于策略和关于后果的偏好关系将用同样符号表示.

对应着有限个后果的策略称为简单策略（或称阶梯函数），简单策略 f 用 $(x_1, A_1; x_2, A_2; \cdots; x_n, A_n)$ 表示，其中
$$f(s) = x_i \quad (\forall s \in A_i, 1 \leqslant i \leqslant n).$$

对于 $f, g \in F$ 和 $A \subset S$，定义映射 $f\Big|_A^g$ 为

$$f\Big|_A^g(s)=\begin{cases}g(s) & (s\in A),\\ f(s) & (s\in A^c),\end{cases}$$

则 $f\Big|_A^g\in F$,称为 f 和 g 的一个混合策略.其含义理解为当事件 A 不发生时 f 起作用,A 发生时 g 起作用.

定义4　对于 $f,g\in F$ 及 $A\subset S$,若有某个 $h\in F$,使

$$f\Big|_{A^c}^h>g\Big|_{A^c}^h,$$

则称 f 相对于事件 A 优于 g,记为 $f>^A g$,称 $>^A$ 为条件偏好.

另外两个条件偏好关系 $\sim^A$ 和 $\geq^A$ 可以作相应的定义.

定义5　对于 $A\subset S$,若对于任意的 $f,g\in F$,有

$$f\geq^A g,$$

称 A 为无效集.

容易看出,如果 A 是无效集,对于任何 $s\in A^c$,有 $f,g\in F$,使

$$f(s)=g(s).$$

萨凡奇的期望效用定理依赖于下面七条公理:

公理4　$>$ 在 F 上是弱序.

公理5　$\forall f,g,h_1,h_2\in F$ 及 $A\subset S$,

$$f\Big|_{A^c}^{h_1}>g\Big|_{A^c}^{h_1}\Leftrightarrow f\Big|_{A^c}^{h_1}>g\Big|_{A^c}^{h_1}.$$

公理6　如果 A 不是无效集,对于任何 $f\in F$ 及 $x,y\subset X$,

$$f\Big|_A^x>f\Big|_A^y\Leftrightarrow x>y.$$

公理7　$\forall x_1,y_1,x_2,y_2\in X,x_1>y_1,x_2>y_2,A,B\subset S$,

$$(x_1,A;y_1,A^c)>(x_1,B;y_1,B^c)\Leftrightarrow(x_2,A;y_2,A^c)>(x_2,B;y_2,B^c).$$

公理8　至少有 $x^*\in X$,使

$$x^*>x_*.$$

公理9　$\forall f,g,h\in F$ 及 $f>g$,存在 S 的有限分割 $\{A_1,A_2,\cdots,A_n\}$ 使

$$\forall i,f\Big|_{A_i}^h>g\text{ 且 }f>g\Big|_{A_i}^h.$$

公理10　$\forall s\in S$,

$$f>^A g(s)\Rightarrow f\geq^A g.$$

弱序假设公理4的含义与公理1相同;公理5称为肯定原理,它的含义是说策略之间的优劣关系不受能够导致相同后果的事件的影响,它相当于独立性公理(公理3),是该理论的核心假设;公理6保证了后果偏好与策略偏好的对应关系;若把每个括号理解为关于事件 A 与 B 某种混合,则公理7的含义很直观,说明偏好应具有一致性;公理8是一条结构假设,说明决策者不是完全不能分辨后果的优劣的;公理9是一条很强的结构条件,它蕴含着要求状态空间是一个不可数无限集,该条

件使得定理结论中的主观概率具有某种连续性；公理 10 理解为完备性，它保证了模型对所有的策略都适用，并使 u 有界。

定理5 设 $\succ$ 在 F 上满足公理 4 ~ 公理 10，则

1° 存在唯一的定义在 S 全体子集上的有限可加概率 P，P 具有如下性质：$\forall B \subset S$ 及 $\alpha \in (0 \quad 1]$，存在 B 的子集 C，使

$$P(C) = \alpha P(B);$$

2° 存在 X 上的有界实值函数 u，u 在正线性变换意义下具有唯一性；

3° $\forall f, g \in F$，

$$f \succ g \Leftrightarrow E\{u(f(s)), P\} > E\{u(g(s)), P\}. \tag{3-5}$$

该定理的表达是经过斐什伯恩等人简化的，相应的证明可在文献[7]中查阅．定理结论 2° 界定了模型中的效用函数为有界函数，但可以把萨凡奇定理中的偏好假设放宽到适应于无界效用函数．此外，在萨凡奇定理的结构假设中，要求 X 中的后果与每一个状态 $s \in S$ 都有关，这个要求是很苛刻的．一般情况下，若记 $X(s)$ 为在状态 s 发生的条件下，采取各项策略 $f \in F$ 所可能产生的后果子集，则对于不同的 s 和 s'，可能有 $X(s) \cap X(s') = \varnothing$．在此情况下，决策者关于后果的偏好关系不能用策略的偏好关系引入，F 和 $X = U_{s \in S}X(s)$ 上的偏好关系需要分别用不同的二元关系符号定义，可惜目前还没有为相应的模型建立公理体系．

3.6 关于期望效用理论的悖论

由伯努利提出的期望效用原理在经过了冯·诺伊曼、摩根斯顿、萨凡奇等人的完善后，已经成为经济学中合理决策的经典理论，但作为一种指导在风险和不确定环境下进行合理决策的规范性理论，它的合理性一直在受到质疑．最典型的例子是阿勒斯(Allais)悖论和埃尔斯伯格(Ellsberg)悖论．

例1 为了使人们相信期望效用理论与实际的决策行为有较大的差距，巴黎大学著名经济学家阿勒斯教授 1952 年在巴黎举行的一次决策学讨论会上提出一个简单的决策问题，请与会的众多著名决策理论专家作答，其中包括期望效用理论的主要奠基人萨凡奇教授．阿勒斯所提出的两个简单问题如下．

问题1 如何选择 A_1 与 B_1？

A_1 表示稳得 1 000 000 美元，记为 $A_1 = \delta_{\$1\,000\,000}$，$B_1$ 表示一个抽奖，以 10% 的可能性得 5 000 000 美元，89% 的可能性得 1 000 000 美元，1% 的可能性什么也得不到，记此抽奖为

$$B_1 = 0.1\delta_{\$5\,000\,000} + 0.89\delta_{\$1\,000\,000} + 0.01\delta_{\$0}.$$

问题2 如何选择 A_2 与 B_2？

其中 $A_2 = 0.11\delta_{\$1\,000\,000} + 0.89\delta_{\$0}$，$B_2 = 0.1\delta_{\$5\,000\,000} + 0.90\delta_{\$0}$.

大多数与会者，包括萨凡奇教授的选择都是在 A_1 与 B_1 之间选 A_1，宁愿稳得 1 000 000 美元而不愿去冒风险；在 A_2 与 B_2 之间选 B_2，因为 A_2 和 B_2 都具有很大的风险，B_2 虽比 A_2 得钱的可能性小些，但金钱数额却大很多，值得去冒险．但是，以萨凡奇为代表的这种选择方式正好违背了期望效用理论．事实上，按照期望效用理

论,如果在 A_1 与 B_1 之间选择了 A_1,则在 A_2 与 B_2 之间应该选择 A_2;反之亦然,因为四项抉择的期望效用值分别为:

$$\begin{aligned}
&EU(A_1) = u(\$1\,000\,000),\\
&EU(B_1) = 0.1u(\$5\,000\,000) + 0.89u(\$1\,000\,000) + 0.01u(\$0),\\
&EU(A_2) = 0.11u(\$1\,000\,000) + 0.89u(\$0),\\
&EU(B_2) = 0.1u(\$5\,000\,000) + 0.9u(\$0);
\end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned}
A_1 \succ B_1 &\Leftrightarrow EU(A_1) > EU(B_1)\\
&\Leftrightarrow 11u(\$1\,000\,000) > 10u(\$5\,000\,000) + u(\$0)\\
&\Leftrightarrow EU(A_2) > EU(B_2) \Leftrightarrow A_2 \succ B_2.
\end{aligned}$$

因此,以萨凡奇为代表的这种选择方式是与期望效用原理不协调的,本质上,是与独立性公理不协调的,称为**阿勒斯悖论**.事实上,把 A_1, B_1, A_2, B_2,分别改写为:

$$A_1 = 0.11\delta_{\$1\,000\,000} + 0.89\delta_{\$1\,000\,000},$$

$$B_1 = 0.11\left(\frac{1}{11}\delta_{\$0} + \frac{10}{11}\delta_{\$5\,000\,000}\right) + 0.89\delta_{\$1\,000\,000},$$

$$A_2 = 0.89\delta_{\$0} + 0.11\delta_{\$1\,000\,000},$$

$$B_2 = 0.89\delta_{\$0} + 0.11\left(\frac{1}{11}\delta_{\$0} + \frac{10}{11}\delta_{\$5\,000\,000}\right),$$

由独立性公理,有

$$A_1 \succ B_1 \Rightarrow A_1 = \delta_{\$1\,000\,000} \succ \frac{1}{11}\delta_{\$0} + \frac{10}{11}\delta_{\$5\,000\,000},$$

而

$$B_2 \succ A_2 \Rightarrow \frac{1}{11}\delta_{\$0} + \frac{10}{11}\delta_{\$5\,000\,000} \succ \delta_{\$1\,000\,000} = A_1,$$

与 $\succ$ 的非对称性矛盾.

如果说阿勒斯悖论是针对效用这个基本元素而设计的,那么以下的埃尔斯伯格悖论则是针对不确定性设计的.

例2　有两只罐子 A 和 B,各装 100 只球,其中 A 罐中有 50 只白球和 50 只红球,B 罐中也装红球和白球,但不知道红球与白球的比例.参赛者先认定一种颜色,然后在 A 或 B 中任取一球,如果该球的颜色与认定的相同,获奖 100 美元,否则无奖,应该如何选择?

从概率论的直观含义来理解,选择哪一个罐子以及选择哪一种颜色的球应该是没有差别的.当不知道两种颜色球的数目比例时,没有理由认为一种颜色出现的机会应该比另一种颜色出现的机会更大,因此,对有理性的选择者来说,大量重复该实验后各种选择的数目应平衡.但实验证实[6],选择者对选择颜色的观点是无差别的,但在选择罐时,偏向于选择 A 罐,即倾向于选择知道比例的球罐.下面将看到这种选择违背了萨凡奇的肯定原理(公理 5).

事实上,在埃尔斯伯格问题中,状态空间、后果空间和策略空间可分别记为:

$$S = \{s_{RR}, s_{RW}, s_{WR}, s_{WW}\},$$

$$X = \{\$0, \$100\},$$

$$F = \{AR, AW, BR, BW\}.$$

其中状态 s_{RR} 表示无论从 A 中还是 B 中摸出的都是红球；s_{RW} 表示从 A 中摸出红球，从 B 中摸出白球；s_{WR} 和 s_{WW} 相应地理解；策略 AR 表示认为选择红色，并从 A 中摸球；BW 表示认定选择白色并从 B 中摸球；AW 和 BR 可作同样的理解.

考虑事件 $C = \{s_{RR}, s_{WW}\}$，有

$$\mathrm{AR}(s) = \mathrm{BR}(s), \quad \mathrm{AW}(s) = \mathrm{BW}(s) \qquad (\forall s \in C),$$
$$\mathrm{AR}(s) = \mathrm{BW}(s), \quad \mathrm{AW}(s) = \mathrm{BR}(s) \qquad (\forall s \in C^c).$$

按照肯定原理(公理 5)，应有

$$\mathrm{AR} > \mathrm{BR} \Leftrightarrow \mathrm{BW} > \mathrm{AW}.$$

即 AR 与 BR 的优劣关系和 BW 与 AW 之间的优劣关系一致. 但实际的选择行为却是

$$\mathrm{AR} \sim \mathrm{AW} > \mathrm{BW} \sim \mathrm{BR},$$

与肯定原理相矛盾，因而被称为**埃尔斯伯格悖论**. 这其实是在讨论人们在对状态信息毫无了解情况下的行为方式. 究竟是应该规定人们的选择行为符合萨凡奇的公理假设，还是应该发展新的理论来解释人们的选择行为?

以阿勒斯悖论、埃尔斯伯格悖论等为出发点，许多经济学家、保险学家、决策理论家以及行为心理学家等分别从**合理行为途径**(rational approach) 和**描述途径**(descriptive approach) 两个方向系统地研究了应用效用理论的诸多问题. 有一系列的实验证据[5] 表明，这套规范化的合理决策理论本身的"合理性"是有问题的，因此，从这套合理行为公理假设推出的用于评价策略优劣的期望效用准则是有问题的.

20 世纪 80 年代以来，已经有一系列的研究试图放宽期望效用理论中关于"合理行为"的假设，并发展了一系列用于计算概率分布效用的非线性表达方式，常称之为非线性效用理论[8]，并普遍认为非线性模型更接近人们的实际偏好. 但这些理论都具有相当的复杂程度，这些模型被用于实际决策问题还处于尝试性阶段.

4 均值 - 方差原理和随机优势模型

4.1 概 述

作为评价决策方案优劣的一条标准，最大期望效用原理无疑具有最深远影响，但这并不意味着它是唯一的风险决策原理. 本章将介绍另外两条原理及其相应的模型，分别称为均值 - 方差原理和随机优势模型，它们在与金融有关的决策问题中有广泛的应用. 为此，本章的讨论限于以金额值表示的决策后果，仍约定每项决策方案对应着一个概率分布. 问题的焦点是：对于两个决策方案 f 和 g，如何评价它们的优劣?

4.2 均值 - 方差原理

由于策略 f 对应的概率分布的金额期望值 $E(f)$ 相当于策略 f 对应的平均回

报,因此它对于决策者来说是越大越好.但实际上,平均回报高的方案也往往对应着较大的"风险".记 f 所对应的"风险"为 $R(f)$,它对于决策者来说是越小越好.因此,可把"最大平均回报 - 最小风险"作为评价一项策略优劣的标准,即

$$E(f) \geqslant E(g), R(f) \leqslant R(g) \Rightarrow f \succeq g. \tag{4-1}$$

关键问题是如何度量 f 所对应的风险 $R(f)$?马尔科维兹(Markowitz,1952)最早提出用方差来度量风险.记 f 的方差为 $\mathrm{var}(f)$,对于策略 f 和 g,**均值 - 方差原理**可表示为

$$E(f) \geqslant E(g), \quad \mathrm{var}(f) \leqslant \mathrm{var}(g) \Rightarrow f \succeq g. \tag{4-2}$$

均值 - 方差原理在投资组合分析、资本定价模型等金融决策问题中有非常成功的应用,马尔科维兹还因此贡献而荣获 1991 年度诺贝尔经济学奖.

例1　考虑投资回报为随机变量 $X_i(i=1,2,\cdots,n)$ 的 n 种证券,$E(X_i)=\mu_i$,且 $\mathrm{cov}(X_i,X_j)=\sigma_{ij}^2$.设对每种证券的投资份额为 w_i,$w_i \geqslant 0$,$\sum_{i=1}^{n} w_i = 1$,则总的投资回报为 $Z=\sum_{i=1}^{n} w_i X_i$.寻求最佳投资组合常用的方式之一是,在固定平均回报 μ 的条件下求最小方差的解 $w(\mu)$,即求解最优化问题:

$$\min_{w} \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \sigma_{ij}^2 w_i w_j, \ \underset{\text{s.t.}}{} \sum_{i=1}^{n} w_i \mu_i = \mu, \quad w_i \geqslant 0, \quad \sum_{i=1}^{n} w_i = 1. \tag{4-3}$$

围绕着用方差来度量风险是否恰当的问题,马尔科维兹等人还提出了一系列改进模型,其中之一是考虑到朝平均值上方偏离的后果值虽然使方差增大,但对决策者来说却是好事,因此,用"半方差"来度量风险更合适,**半方差**被定义为

$$\mathrm{Svar}(f) = E(\min(0, x - E(f)))^2. \tag{4-4}$$

更一般地,可以把策略 f 的"风险"度量为:

$$R(f) = \int_{-\infty}^{\lambda} |c - x|^{\alpha} \mathrm{d}p(x). \tag{4-5}$$

其中 $p(x)$ 是 f 对应的概率分布;参数 c 是决策者用于考虑离差的参考水平,比如可以选择为均值或最差后果值等;参数 α 则反映了对离差大小之间的强调程度,当 $\alpha>1$ 时,离差大的项被强调了,当 $0<\alpha<1$ 时则相反;参数 λ 则限定了需要用于考虑离差的后果范围.

均值-方差原理用策略对应的概率分布的一、二阶矩来衡量策略之间的优劣关系;而期望效用原理则认为策略之间的优劣不仅仅取决于概率分布中所包含的信息,还与决策者个人的效用函数有关.因此,期望效用在理论上比均值-方差模型更具普遍性,只有在少数几种特殊情况下,均值-方差原理才与期望效用原理相互协调.这几种特殊情况为:

(1)决策者的效用函数为二次多项式函数;

(2)策略所对应的概率分布为正态分布;

(3)策略所对应的概率分布为对数正态分布.

4.3　随机优势模型

如果把策略之间的优劣关系看作一个二元关系,则从第 3 章中可知,期望效用

准则所描述的是一个弱序，亦即是一个完全序．对于任何两项策略，只要各自的期望效用值存在，都可以比较其优劣．但均值-方差原理仅仅用概率分布中所包含的一部分信息即用一、二阶矩来确定策略之间的优劣关系，从最优决策来说，是一种帕雷托(Pareto)最优决策，从二元关系的角度看，这是一种"半序"(quasi order)关系．

定义 1 若二元关系$\geq$是自反和传递的，则称它是一个半序(quasi order)；如果它还是反对称的，则称为**偏序**(partial order)．

对于概率分布簇，可以定义各种各样的半序或偏序，随机优势(stochastic dominance)是另一类具有十分重要意义的半序．

定义 2 设 X 为实数区间，$P(x)$和 $Q(x)$为策略 f 和 g 分别对应的概率分布函数，若成立

$$P(x)\leqslant Q(x) \qquad (\forall x\in X), \tag{4-6}$$

则称策略 f(随机)一阶优势于策略 g，记作 $f\geq_1 g$；若成立

$$\int_{-\infty}^{x} P(t)\mathrm{d}t \leqslant \int_{-\infty}^{x} Q(t)\mathrm{d}t \qquad (\forall x\in X), \tag{4-7}$$

则称策略 f(随机)二阶优势于策略 g，记作 $f\geq_2 g$；一般地，若成立

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{x}\mathrm{d}s\cdots\int_{-\infty}^{t}}_{n} P(t)\mathrm{d}t \leqslant \underbrace{\int_{-\infty}^{x}\mathrm{d}s\cdots\int_{-\infty}^{t}}_{n} Q(t)\mathrm{d}t \qquad (\forall x\in X), \tag{4-8}$$

则称策略 f(随机)n 阶优势于策略 g，记作 $f\geq_n g$．上述模型称为**随机优势模型**．

容易看出，有 $f\geq_1 g\Rightarrow f\geq_2 g\Rightarrow\cdots\Rightarrow f\geq_n g$．事实上，随机优势模型可以看作是介于均值-方差准则与期望效用准则之间的一类二元关系．均值-方差模型可用概率分布的某些数字特征来衡量策略优劣，与决策者的个人或主观的效用函数无关；期望效用则针对一个决策者的效用函数，是一个纯主观的概念；随机优势强调用概率分布的"整体性质"而不是用部分信息来确定它们之间的优劣关系，而且各种不同的随机优势关系可以对应着某类具有一定共同性质的决策者或者其效用函数．

令

$$\begin{aligned}
&U_1=\{u(x): u'(x)\geqslant 0\},\\
&U_2=\{u(x): u'(x)\geqslant 0,\ u''(x)\leqslant 0\},\\
&\vdots\\
&U_n=\{u(x): (-1)^{k-1}u^{(k)}(x)\geqslant 0,\ k=1,2,\cdots,n\},
\end{aligned}$$

则有如下定理．

定理1 对于前面定义的随机优势关系$\geq_i$和效用函数类 U_i, $i=1,2,\cdots$，成立

$$\begin{aligned}
&f\geq_1 g\Leftrightarrow \mathrm{EU}(f)\geqslant \mathrm{EU}(g) \qquad (\forall u\in U_1),\\
&f\geq_2 g\Leftrightarrow \mathrm{EU}(f)\geqslant \mathrm{EU}(g) \qquad (\forall u\in U_2),\\
&f\geq_3 g\Leftrightarrow \mathrm{EU}(f)\geqslant \mathrm{EU}(g) \qquad (\forall u\in U_3),\\
&\cdots
\end{aligned}$$

关于随机优势模型的详尽讨论及其应用，可参见文献[12]．

需要强调指出的是，期望效用、均值-方差和随机优势准则是风险决策分析的三条主要途径，其中，均值-方差和随机优势模型主要应用于以金额值为决策后果的金融决策问题，如金融分析中的各种"定价"和"平衡"模型等等，但作为一套系

统的理论,它们远不如期望效用理论完善,还有一系列的理论和技术问题需要解决.关于这两个模型的近期发展及其存在的问题,文献[12]中有较详尽的讨论.

期望效用准则的理论意义远远大于其实际应用意义.在一组称为“合理行为”的公理假设下,期望效用模型是一套完备的理论体系,均值 - 方差和随机优势模型都可以作为它的特例,因此,期望效用理论是决策分析的理论基础.

作为决策分析的理论基础,期望效用理论被一致公认为是一套很好的用于指导人们在风险和不确定环境下作出合理决策的规范理论,但对于描述许多实际决策行为来说,它并不是一套很恰当的描述理论[2].

强调决策理论用于指导人们作出合理决策的规范功能和强调决策理论用于描述实际中的许多合理决策行为的描述功能,构成了决策分析研究的两个主要方向,近 10 年来,在这两个方向上都有一系列研究成果[5,8],随着现代信息处理技术的飞速发展及其在处理不确定现象中的有效应用,传统决策分析必将获得更快的进展.

参 考 文 献

1　Arrow K J. Aspects of the theory of risk bearing. New York: Academic Book Store, 1965.

2　Berger J O. Statistical decision theory. New York: Springer-Verlag, 1980.

3　Bernoulli D. Exposition of a new theory on the measurement of risk. Econometrica, 1954 (22): 23 ~ 36

4　Corner J L, Kirkwood C W. Decision analysis applications in the OR literature 1970 ~ 1989. Operations Research, 1991, 39(2)

5　Edwards W. Utility theories: measurement and applications. Boston: Kluwer Academic Publishers, 1992.

6　Ellsberg D. Risk, ambiguity and the savage axioms. Quarterly Journal of Economics, 1961 (75): 643 ~ 669

7　Fishburn P C. Utility theory for decision making. New York: Wiley, 1970.

8　Fishburn P C. Nonlinear preference and utility theory. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 1988.

9　Hogg R V, Klugman S A. Loss distributions. New York: Wiley, 1984.

10　Kahneman D, Tversky A. Prospect theory: an analysis of decision under risk. Econometrica, 1979(47): 263 ~ 291

11　Keeney R L. Decision analysis: an overview. Operations research, 1982(30): 803 ~ 838

12　Levy A. Stochastic dominance and expected utility. Management science, 1992(38): 555 ~ 593

13　Markowitz H. Portfolio selection. Journal of finance, 1952 (7): 77 ~ 91

14　Pratt J W. Risk aversion in the small and in the large. Econometrica, 1964(32): 122 ~ 136

索　引

使用说明：1. 本索引收录了本卷正文中用黑体排印的大部分术语。

2. 术语依第一字的读音按汉语拼音字母表顺序排列。如果拼音相同，根据音调，按阴平、阳平、上声、去声、轻声的次序排列。如果音和音调也相同，按总笔画数排列。

3. 以符号、数字或字母起首的术语，按符号、数字、拉丁字母、希腊字母的顺序，分别集中排在以汉字起首的术语前面。其中字母依首写字母按字母的顺序排列。

4. 以数学家译名为首的术语（例如，傅里叶变换），依译名按汉字的排法排列。

5. 术语后面的数字，表示该术语出现在本书中的页码。

以符号字起首的术语

以拉丁字母起首的术语

以希腊字母起首的术语

以汉字起首的术语

A

B

C

E

F

G

H

J

K

L

M

S

T

Y

Z